

307 226

22  
1980

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

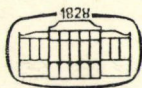
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR  
ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
PÁL LÉNÁRD

XXVIII. KÖTET

I. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1980

9



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10-10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár  
Biofizikai Intézet  
1444 Budapest VIII. Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 72 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre szűkség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

# **A KÉPLÉKENY ALAKÍTÁS VIZSGÁLATI MÓDSZEREI**

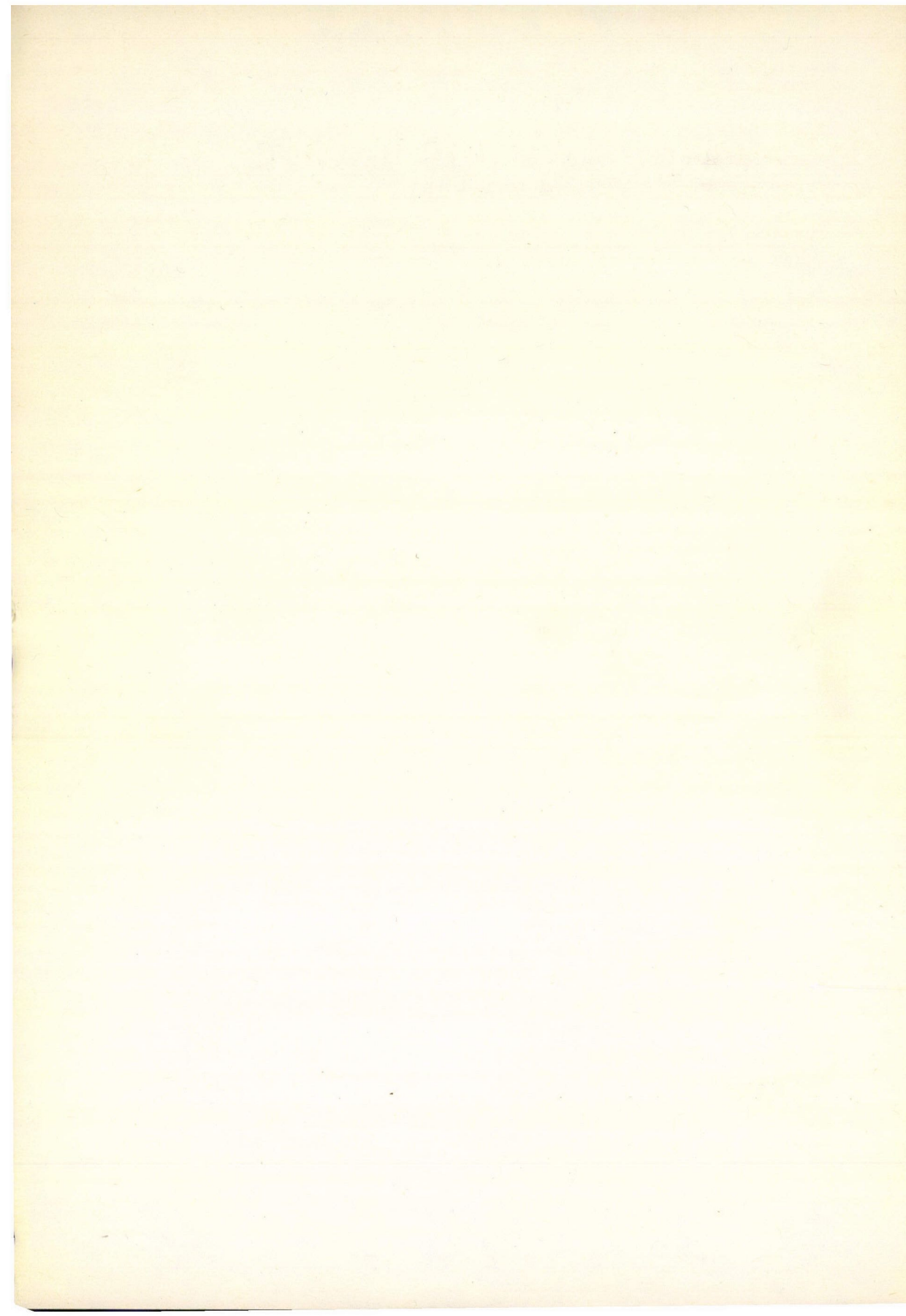
Szerkesztette:

**KOVÁCS ISTVÁN**

Jelen cikkgyűjtemény a fémek képlékeny alakváltozására vonatkozó vizsgálati módszerek elvi és kísérleti alapjairól kíván szisztematikusan a jelenlegi irodalmi eredmények szintjén felépített áttekintést adni. A cikkgyűjtemény alapját az ELTE Általános Fizika Tanszékének 1978 januárjában tartott 3 napos szemináriumának anyaga képezi. Az összeállításnak nem lehet célja a teljességre való törekvés, hanem az egyes fejezetek inkább csak szemelvényeket jelentenek az egyes vizsgálati módszerek legfontosabb jellegzetességeiről és alkalmazásairól.

MACSAR  
KÖNYVTÁRA





# A KÉPLÉKENY ALAKÍTÁS VIZSGÁLATI MÓDSZEREI

## 1. AZ EGYTENGELYŰ NYÚJTÁS

KOVÁCS ISTVÁN

ELTE, Általános Fizika Tanszék

### TARTALOM

1. Bevezetés .....	3
2. A képlékeny testek tulajdonságai .....	6
3. A nyújtásvizsgálat általános tárgyalása .....	8
3.1. Állandó nyújtási sebesség .....	8
3.2. Állandó terhelésű kúszás .....	9
3.3. Állandó feszültségű kúszás .....	9
3.4. A rugalmas alakváltozások figyelembevétele .....	9
3.5. Feszültségrelaxáció .....	10
4. Az alakváltozás stabilitása .....	10
4.1. Stabilitási kritériumok .....	11
4.1.1. Mechanikai hibák .....	12
4.1.2. Szuperplaszticitás .....	12
4.1.3. Geometriai hibák .....	13
4.1.4. Stabilitási feltételek a maximális erő alapján .....	13
5. Irodalom .....	13

### 1. Bevezetés

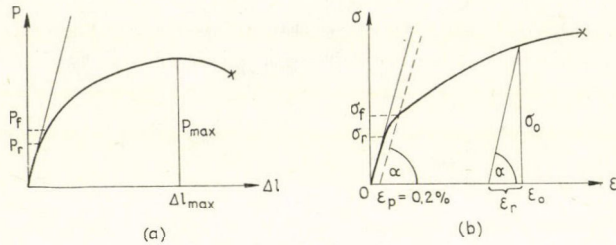
A szilárd testek mechanikai erőhatásokkal szemben többféleképpen viselkednek. Ha az erőhatás nem túl nagy, a test alakja rugalmasan változik meg, más szóval az erőhatás megszűnte után visszanyeri eredeti alakját. Elég nagy erők hatására azonban az alakváltozás egy része nem rugalmas, illetve maradó lesz. Ez utóbbit nevezük képlékeny alakváltozásnak vagy plasztikus deformációnak. Nem rugalmas vagy anelasztikus az alakváltozás, ha az erőhatás megszűnte után eltűnik ugyan, de az erőhatáshoz képest időben lemaradva. A következőkben csak a képlékeny alakváltozással foglalkozunk.

Az átmenet a rugalmas és képlékeny alakváltozás között nem éles. Ha az alakváltozást nagy pontossággal mérjük, akkor már viszonylag kis erők alkalmazása és megszüntetése után is megfigyelhetünk képlékeny alakváltozást. Ezért mind a rugalmassági határ — az a legnagyobb erő, amelynél kisebbek hatására a test csak rugalmas alakváltozást szenved —, mind a képlékeny alakváltozás megindulásához szükséges legkisebb erő, az ún. folyáshatár, definíciója önkényes megállapodást is magában foglal.

A makroszkopikus viszonyok jellemzői legegyszerűbben egy polikristályos (makroszkopikusan homogén és izotrop), körkeresztmetszetű fémhenger nyújtásakor állapíthatók meg. Terheljünk meg egy ilyen rudat fokozatosan növekvő tengelyirányú erővel és rögzítsük folytonosan a  $P$  erő és a  $\Delta l$  megnyúlás közötti összefüggést. Ekkor az 1.a) ábrán látható görbét kapjuk. A csillaggal jelzett megnyúlás



elérésekor a test eltörik. Ez a görbe a vizsgált méretű testet jellemzi. Rögzített anyagi minőség és előzetes kezelések (más szóval azonos előélet) esetén a görbe az anyagi minőségre jellemző, célszerű ezért az erő—megnyúlás helyett a felületegységre ható erő és relatív megnyúlás közötti összefüggést ábrázolni. Ekkor az 1.b) ábrán



1. ábra. a) Erő—megnyúlás diagram,  
b) feszültség relatív megnyúlás diagram

látható görbét kapjuk. Az itt szereplő

$$\sigma = \frac{P}{q} \quad (1)$$

mennyiség a mintára egy adott pillanatban ható valódi feszültség ( $q$  a pillanatnyi keresztmetszet). A minta kezdeti  $q_0$  keresztmetszetével definiált  $P/q_0$  mennyiséget mérnöki feszültségnek nevezik.

A tapasztalat szerint a képlékeny alakváltozás során a test térfogata csak igen kis mértékben változik meg, ezért a térfogat jó közelítéssel állandónak tekinthető. Ennek felhasználásával összefüggést adhatunk meg a pillanatnyi  $q$  keresztmetszet és a relatív megnyúlás között. Ha a minta pillanatnyi hossza  $l = l_0 + \Delta l$ , akkor a

$$q_0 l_0 = ql \quad (2)$$

egyenlőség felhasználásával:

$$q = q_0 \frac{l_0}{l_0 + \Delta l} = \frac{q_0}{1 + \varepsilon}, \quad (3)$$

ahol  $q_0$  és  $l_0$  a minta kezdeti keresztmetszete, illetve hossza, és

$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{l_0}, \quad (4)$$

az alakváltozás mértékét jellemző relatív megnyúlás, a mérnöki deformáció.

Nagy nyúlásoknál az alakváltozás mértékét az ún. valódi deformációval célszerű jellemezni. Ha egy próbatestet  $l_0$ -ról  $l$  hosszúságúra nyújtunk meg, akkor ennek definíciója:

$$e = \int_{l_0}^l \frac{dl}{l} = \ln(1 + \varepsilon). \quad (5)$$



Az elnevezést a következők indokolják. A (2) feltétel miatt a képlékeny alakváltozást jellemző deformációs tenzor diagonális elemei összege nulla kell legyen.  $z$  tengely irányú nyújtásnál a másik két diagonális elem a relatív harántösszehúzódot jellemzi. (2) differenciáljából infinitezimális nyújtás esetén:

$$\frac{\Delta a}{a} = de_{xx} = de_{yy} = -\frac{1}{2} \frac{dl}{l} = -\frac{1}{2} de_{zz},$$

ahol  $a$  a próbatest sugara. Ezt és (3)-at felhasználva egyszerűen belátható, hogy véges nyújtásnál

$$e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} = 0,$$

míg

$$\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} \neq 0.$$

Térjünk most vissza az 1.a), b) ábrához. Mivel az átmenet a rugalmas alakváltozástól a képlékenybe nem éles, ezért a folyáshatár értékét meghatározott mértékű alakváltozáshoz szokták rögzíteni.

A legtöbb esetben folyáshatárként az  $\varepsilon=0,2\%$ -os maradó alakváltozás létrehozásához szükséges feszültséget választják. Növekvő képlékeny alakváltozással a további alakváltozáshoz növekvő feszültség szükséges. Ezt a jelenséget alakítási keményedésnek nevezzük. Ez pontosabban azt jelenti, hogy ha pl. az  $\varepsilon_0$  deformáció elérése után az erőhatást megszüntetjük, akkor a deformáció mértéke (az anelasztikus alakváltozást elhanyagolva) az  $\varepsilon_r$  rugalmas alakváltozással csökken. A test újratelhelésekor pedig a  $\sigma_0$  feszültség eléréseig az alakváltozás rugalmas lesz, s a képlékeny deformáció csak  $\sigma > \sigma_0$  feszültségek hatására folytatódik. A nem nulla alakváltozáshoz tartozó,  $\sigma = \sigma(\varepsilon)$  pillanatnyi folyáshatárt folyási feszültségnek nevezzük.

Az 1.a) és b) ábra között lényeges különbség az, hogy az erő—megnyúlás görbének maximuma van. A maximum utáni erőcsökkenés nem az anyag lágyulása miatt áll elő. Ez világosan kitűnik az 1.b) ábrából, ahol a feszültség a törésig monoton nő. A maximum fellépése a legegyszerűbb esetben a test kontrakciójának a következménye. A maximális erő megközelítésekor a próbatest egy helyén a keresztmetszet nagymértékben csökkenni kezd, s emiatt a feszültség növekedése csökkenő erő mellett is rövidesen törést eredményez. A maximális erő ezért a vizsgált próbatest szilárdságára jellemző. Ez az oka annak, hogy a gyakorlatban a szilárdságot a

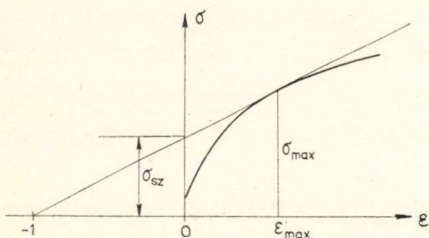
$$\sigma_B = \frac{P_{\max}}{q_0} \quad (6)$$

mennyiséggel jellemzik és névleges szakítószilárdságnak vagy szakítószilárdságnak nevezik. Ennek közvetlen fizikai tartalma nincs, mert nem összetartozó erő és keresztmetszet definiálja.

A maximális erő eléréseig a keresztmetszet egyenletesen változik a nyúlással, ezért a nyúlásnak ezt a szakaszát egyenletes nyúlásnak is nevezik. A maximális erő után a keresztmetszetet már nem számíthatjuk ki (3) felhasználásával, mert a kontrakció megindulása után (3) már nem érvényes. A maximum helyén:

$$\left( \frac{dP}{d\varepsilon} \right)_{\varepsilon_{\max}} = \left[ \frac{d(q\sigma)}{d\varepsilon} \right]_{\varepsilon_{\max}} = 0.$$





2. ábra. A maximális erőhöz tartozó valódi feszültség meghatározása

Ebből (3) felhasználásával

$$\left(\frac{d\sigma}{d\varepsilon}\right)_{\varepsilon_{\max}} = \frac{\sigma_{\max}}{1 + \varepsilon_{\max}} = \sigma_B,$$

mert  $\sigma_{\max} = \sigma_B(1 + \varepsilon_{\max})$ . Ez az összefüggés lehetővé teszi a névleges szakítószilárdság meghatározását a valódi feszültség—deformáció görbe felhasználásával (2. ábra). Ha  $\sigma > \sigma_{\max}$ , akkor a 2. ábra alapján

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} < \frac{\sigma}{1 + \varepsilon},$$

ami azt jelenti, hogy az anyag ekkor instabil, mert csökkenő erő növekvő alakváltozást eredményez. Ezért a stabilitás feltétele

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} \geq \sigma, \quad (7)$$

ami az alakítási keményedés sebességére ad feltételt. A (7) összefüggést Considère-kritériumnak nevezzük [1].

## 2. A képlékeny testek tulajdonságai

Az eddigiekben olyan egyszerű testeket tárgyaltunk, amelyek alakváltozásához szükséges feszültség csak az előzetes deformációtól függ. A valóságos testek ennél általában bonyolultabb viselkedést mutatnak. A következőkben csak a makroszkopikusan homogén, polikristályos testekkel foglalkozunk.

Ha egy szilárd testet  $\sigma$  feszültséggel megterhelünk, akkor — általános esetben —  $\dot{\varepsilon}$  sebességű alakváltozás jön létre. Az alakváltozás sebessége a feszültség nagyságán kívül függ a  $T$  hőmérséklettől, a feszültség változási sebességétől, az előzetes deformációtól és egy sor  $S_i$  szerkezeti paramétertől. Az alakváltozást leíró deformációs állapotegyenlet (constitutive equation [2]) ezért általában az alábbi alakban adható meg:

$$\dot{\varepsilon} = f(\sigma, \dot{\sigma}, \varepsilon, T, S_1, S_2, \dots). \quad (8)$$

Az  $S_i$  szerkezeti paraméterek az anyag állapotát határozzák meg. Két különböző próbatest azonos állapotban van, ha  $S_i$  paramétereik megegyeznek. Az  $S_i$  paraméterek általában egyrészt az anyag „mechanikai állapotát” — kristályszerkezetét, hibaszerkezetét, belső feszültségeit, előzetes alakváltozás hatását stb. —, másrészt termodinamikai állapotát jellemzik.

A (8) összefüggést valóságos esetre egzaktul megadni jelenlegi ismereteink alapján nem lehet. A nehézséget nemcsak az  $f$  függvénykapcsolat konkrét meghatározása jelenti, hanem az is, hogy jelenleg nem világos, milyen mérhető makroszkopikus fizikai mennyiségekkel lehet a „mechanikai állapotjelzőket” megadni.

Termodinamikai szempontból ez azt jelenti, hogy a test pillanatnyi „alakja”, amely az  $\varepsilon$  deformációval jellemezhető, nem állapotjelző, ellentétben a test tér-



fogatával [3]. Más szóval, az anyag mechanikai állapotának megváltozása a (8) összefüggésben szereplő változóknak megfelelő koordinátatérben nemcsak a kezdő és végállapot koordinátáitól függ, hanem attól az úttól is, amely mentén a test a kezdő-pontból a végpontba eljutott.

Ezek a nehézségek indokolják, hogy a (8) összefüggés meghatározásában egyszerűsítő feltevéseket vezessünk be. Mivel a kísérleti vizsgálatok általában állandó hőmérsékleten történnek, ezért az explicit hőmérsékletfüggéstől eltekinthetünk. Feltesszük továbbá Hart nyomán [4, 5], hogy  $d\sigma$  feszültségnövekmény hatására a minta pillanatnyi állapotától függő  $de$  deformáció, illetve  $d\dot{e}$  deformáció sebességnövekmény jön létre, amelyeket a következő összefüggéssel adhatunk meg:

$$d \ln \sigma = \gamma de + m d \ln \dot{e}, \quad (9)$$

ahol az  $\ln \sigma$  és az  $\ln \dot{e}$  változókat egyszerűsítési okokból vezettük be. Így a  $\gamma$  és  $m$  együtthatók dimenzió nélküli mennyiségek. Az egyenlet átrendezésével:

$$de = -\frac{1}{\gamma} d \ln \sigma + \frac{m}{\gamma} d \ln \dot{e}. \quad (10)$$

A (9), (10) kifejezés általában nem teljes differenciál, ami az utóbbi esetben azt fejezi ki, hogy az alakváltozás integrálja a  $(\sigma, \dot{e})$  síkon függ az integrálás útjától is, más szóval az alakváltozás mértéke általában nem állapotjelző. Ha azonban a  $\gamma, m$  paraméterek csak a  $\sigma, \dot{e}$  változók függvényei, azaz

$$\gamma = \gamma(\sigma, \dot{e}), \quad (11)$$

$$m = m(\sigma, \dot{e}),$$

akkor a Pfaff-féle kifejezések elmélete szerint mindig található olyan  $K$  integráló szorzó [6], amellyel a

$$Kde = -\frac{K}{\gamma} d \ln \sigma + K \frac{m}{\gamma} d \ln \dot{e} \quad (12)$$

kifejezés már teljes differenciál. Ennek integrálja független az úttól, ami azt jelenti, hogy a (10), (11) összefüggések teljesülésekor létezik olyan

$$k = k(\sigma, \dot{e}) = \int Kde \quad (13)$$

függvény, amely az alakított anyag állapotát jellemzi. Ezt a  $k$  függvényt Hart az anyag keménységének nevezte el [4, 5, 7], amely természetesen nem azonos a keménységméréssel kapott adattal.

A  $\gamma$  és  $m$  mennyiségek az anyag fontos mechanikai jellemzői. (9)-ből

$$\gamma = \frac{1}{\sigma} \left( \frac{\partial \sigma}{\partial e} \right)_e, \quad (14)$$

$$m = \frac{\dot{e}}{\sigma} \left( \frac{\partial \sigma}{\partial \dot{e}} \right)_e. \quad (15)$$

$\gamma$ -t az alakítási keménység sebességének, míg  $m$ -et az alakítási sebesség érzékenységeként nevezik.



### 3. A nyújtásvizsgálat általános tárgyalása

Állandó hőmérsékleten az anyagok széles körére érvényes a (9) összefüggés, azaz az alakváltozáshoz szükséges feszültség csak az előzetes alakítás mértékétől és az alakváltozás sebességétől függ:

$$\sigma = \sigma(e, \dot{e}). \quad (16)$$

Terheljünk meg egy ilyen tulajdonságú próbatestet egy szakítógéppben  $P$  erővel. Általános esetben a  $P=q\sigma$  összefüggésben minden mennyiség az idő függvénye. Képezzük a  $P=q\sigma$  összefüggés logaritmikus idő deriváltját:

$$\frac{\dot{P}}{P} = \frac{\dot{\sigma}}{\sigma} + \frac{\dot{q}}{q}. \quad (17)$$

(1) és (16), valamint (14), (15) felhasználásával

$$\frac{\dot{q}}{q} = -\frac{\dot{l}}{l} = -\dot{\epsilon} \quad (18)$$

és

$$\frac{\dot{\sigma}}{\sigma} = \frac{1}{\sigma} \left( \frac{\partial \sigma}{\partial e} \right)_e \dot{e} + \frac{1}{\sigma} \left( \frac{\partial \sigma}{\partial \dot{e}} \right)_e \ddot{e} = \gamma \dot{e} + m \frac{\ddot{e}}{\dot{e}}. \quad (19)$$

De

$$\ddot{e} = \frac{\ddot{l}}{l} - \left( \frac{\dot{l}}{l} \right)^2, \quad (20)$$

amivel

$$\frac{\dot{\sigma}}{\sigma} = \gamma \frac{\dot{l}}{l} + m \left( \frac{\ddot{l}}{l} - \frac{\dot{l}^2}{l^2} \right). \quad (21)$$

Ezt és (18)-at (17)-be helyettesítve a következő kifejezést kapjuk:

$$\frac{\dot{P}}{P} = (\gamma - 1) \frac{\dot{l}}{l} + m \left( \frac{\ddot{l}}{l} - \frac{\dot{l}^2}{l^2} \right). \quad (22)$$

Eredményünk bármilyen, a (16) összefüggést kielégítő anyag általános nyújtási alakváltozására érvényes. A gyakorlatban a vizsgálatokat azonban többnyire speciális körülmények között végzik, amikor a (21), (22) egyenlet egyszerűbb lesz. A következőkben röviden áttekintjük a különböző vizsgálati módokat.

#### 3.1. Állandó nyújtási sebesség

A gyakorlatban alkalmazott szakítógépekben a vizsgálatokat többnyire a próbatest állandó sebességű nyújtásával végzik. A berendezés ilyenkor erő—megnyúlás diagramot rajzol fel, amelyből az (1)—(5) összefüggések felhasználásával a kérdéses nyújtási sebességhez tartozó feszültség—deformáció görbe megszerkeszthető.

Állandó nyújtási sebességű vizsgálatból meghatározható még a (11) paraméterek különbsége. Ekkor ugyanis  $\dot{l}=0$  és így (22)-ből

$$\left( \frac{\partial \ln P}{\partial \ln l} \right)_i = \gamma - m. \quad (23)$$

### 3.2. Állandó terhelésű kúszás

A kúszásvizsgálatok legegyszerűbben állandó terhelés mellett valósíthatók meg. Ilyenkor a mérésből a megnyúlás időbeni változását határozhatjuk meg. A megnyúlás során a próbatestre ható feszültség kismértékben változik. Ugyanis mivel  $\dot{P}=0$ , így (17) és (18)-ból

$$\frac{\dot{\sigma}}{\sigma} = \frac{\dot{l}}{l}. \quad (24)$$

(21) és (24) felhasználásával ismét kaphatunk egy összefüggést a  $\gamma$  és  $m$  paraméterekre:

$$\left( \frac{\partial \ln l}{\partial \ln l} \right)_P = \frac{1-\gamma+m}{m}. \quad (25)$$

### 3.3. Állandó feszültségű kúszás

Az állandó feszültségű kúszás kísérleti megvalósítása jelentősen nehezebb az előbbinél, mert a terhelést úgy kell változtatnunk a kúszás során, hogy  $\dot{\sigma}=0$  legyen. Ha ez teljesül, akkor (21)-ből (25) helyett a következő összefüggést kapjuk:

$$\left( \frac{\partial \ln l}{\partial \ln l} \right)_\sigma = 1 - \frac{\gamma}{m}. \quad (26)$$

### 3.4. A rugalmas alakváltozások figyelembevétele

Az előző esetekben a rugalmas alakváltozásokat elhanyagoltuk a képlékeny deformáció mellett. Bizonyos esetekben — pl. feszültségrelaxációnál — a rugalmas alakváltozásnak lényeges szerepe van. A következőkben ezt is figyelembe vesszük.

Jellemezzük a próbatestet és a berendezést együtt rugalmas szempontból egy  $K_0$  „rugóállandóval”. Legyen a minta hosszváltozását előidéző „keresztfej” mozgási sebessége  $v$ . Akkor a próbatest képlékeny alakváltozási sebessége:

$$\dot{e} = \frac{v}{l} - \frac{\dot{P}}{K_0 l}, \quad (27)$$

ahol  $\dot{P}/K_0 = \Delta l_r$ , a rugalmas megnyúlás sebessége. (1), (18) és (27) felhasználásával:

$$\dot{P} = q(\dot{\sigma} - \sigma \dot{e}) = K_0(v - l\dot{e}), \quad (28)$$

amiből

$$\dot{\sigma} = \frac{K_0}{q} \left[ v - l\dot{e} \left( 1 - \frac{q\sigma}{K_0 l} \right) \right]. \quad (29)$$

Általában

$$\frac{q\sigma}{K_0 l} = \frac{P}{K_0 l} \ll 1,$$

és így jó közelítéssel

$$\dot{\sigma} = \frac{K_0}{q} (v - \dot{e}l). \quad (30)$$



### 3.5. Feszültségrelexáció

A nyújtásvizsgálatok egy fontos csoportjában a képlékeny alakváltozást a keresztfej megállításával megszakítják úgy, hogy a mérőfej és a próbatest kapcsolata változatlanul megmarad. Ekkor rögzített  $l$  mellett a képlékeny alakváltozás a rugalmas alakváltozás rovására továbbfolyik, feszültségrelexáció lép fel. A folyamat során  $v=0$ , továbbá  $\dot{l}=\dot{q}=0$ , és így (27)-ből

$$\dot{e} = -\frac{\dot{P}}{K_0 l} = -\dot{e}_r, \quad (31)$$

ahol  $\dot{e}_r$  a rugalmas alakváltozás sebessége. Ebből

$$\frac{d\dot{e}}{\dot{e}} = \frac{d\dot{P}}{\dot{P}}.$$

Ezt és a  $dP=q d\sigma$ , vagy  $d \ln \sigma = d \ln P$  összefüggést felhasználva a (15) paramétert az erő időfüggéséből meghatározhatjuk:

$$m = \left( \frac{\partial \ln P}{\partial \ln \dot{P}} \right)_e. \quad (32)$$

### 4. Az alakváltozás stabilitása

A nyújtási igénybevételnek alávetett testek bizonyos mértékű deformáció után törést szenvednek. A törést megelőzően az alakváltozás instabillá válik. Az instabilitásnak az az oka, hogy a próbatestek mindig tartalmaznak kisebb vagy nagyobb mértékű mechanikai (makroszerkezeti), vagy geometriai (megmunkálási) hibákat. Ezek következményeként az alakváltozás a minta hossza mentén inhomogénné válik, s ez eredményezi az instabilitást.

Az instabilitás természete jelentősen függ az anyag tulajdonságától is. Egy egyszerű példát már láttunk a bevezetésben, amely az alakítási sebességre érzéketlen anyagokra érvényes. A következőkben részletesen megvizsgálunk néhány stabilitási kritériumot a 2. pontban tárgyalt tulajdonságú anyagokra vonatkozóan.

Az alakváltozás stabilitásától függetlenül az erő mindig állandó a minta hossza mentén. Ezért, ha  $x$  a tengelymenti koordináta, akkor az alakváltozás adott időpillanatában ez a következő feltétellel vehető figyelembe:

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial(q\sigma)}{\partial x} = q \frac{\partial \sigma}{\partial x} + \sigma \frac{\partial q}{\partial x} = 0,$$

vagy

$$\frac{\partial \ln q}{\partial x} + \frac{\partial \ln \sigma}{\partial x} = 0. \quad (33)$$

A (2) összefüggést felhasználva és feltéve, hogy a minta kezdeti  $q_0$  keresztmetszete is függvénye az  $x$ -nek megmunkálási hibák miatt, az egyenlet első tagja a következőképpen adható meg:

$$\frac{\partial \ln q}{\partial x} = \frac{d \ln q_0}{dx} - \frac{\partial e}{\partial x}. \quad (34)$$



Nyilvánvaló, hogy e kifejezés második tagja a mechanikai hibák miatt az alakváltozás során kialakuló keresztmetszet-változást jellemzi.

A (33) egyenlet második tagját a (9) összefüggéssel adhatjuk meg:

$$\frac{\partial \ln \sigma}{\partial x} = \gamma \frac{\partial e}{\partial x} + m \frac{\partial \ln \dot{e}}{\partial x}. \quad (35)$$

Behelyettesítve a (34), (35) kifejezéseket (33)-ba, átrendezéssel kapjuk:

$$m \frac{\partial \ln \dot{e}}{\partial x} = (1 - \gamma) \frac{\partial e}{\partial x} - \frac{d \ln q_0}{dx}. \quad (36)$$

Eredményünk azt mutatja, hogy ha a vizsgált próbatest mentén akár megmunkálási hiba, akár mechanikai hiba miatt fellépő deformáció gradiense van, akkor a deformáció sebességének is van gradiense.

A (33) egyenletet átalakíthatjuk a következő kifejezés felhasználásával is:

$$\frac{\partial \ln \dot{e}}{\partial x} = \frac{\partial \ln \dot{q}}{\partial x} - \frac{\partial \ln q}{\partial x}. \quad (37)$$

Ezt és (34)-ből  $(\partial e / \partial x)$ -et (35)-be helyettesítve a (33) egyenlet a következő lesz [8, 9]:

$$m \frac{\partial \ln \dot{q}}{\partial x} = (\gamma + m - 1) \frac{\partial \ln q}{\partial x} - \gamma \frac{d \ln q_0}{dx}. \quad (38)$$

#### 4.1. Stabilitási kritériumok

Az alakváltozási folyamat egy adott pillanatában a minta általában nem homogén vagy azért, mert a lokális keresztmetszete különbözik a többitől, vagy a lokálisan különböző keménysége miatt. Az utóbbi esetben az alakítás mértéke is lokálisan különböző lesz, ami ismét lokális keresztmetszet-eltérésre vezet. Ha a heterogenitás természete olyan, hogy a keresztmetszet-eltérés a további alakváltozás során eltűnik, akkor az alakváltozás stabil, ellenkező esetben instabil. A keresztmetszet-változás alapján a stabilitás kritériumát többféleképpen is definiálhatjuk:

##### a) A stabilitás Hart-féle kritériuma [4]

Az alakváltozás stabil, ha a  $\delta q$  lokális keresztmetszet-eltérés a deformáció során időben csökken, azaz

$$\frac{\delta \dot{q}}{\delta q} \leq 0. \quad (39)$$

Mivel  $q/\dot{q} < 0$ , így (39) a következő, dimenzió nélküli alakban is megadható:

$$\frac{\delta \ln \dot{q}}{\delta \ln q} \leq 0. \quad (40)$$

A (39) feltétel jelentése: ha a keresztmetszet-eltérés negatív, akkor a változási sebesség eltérése (a további csökkenésben az eltérés) a környezethez képest pozitív kell legyen.



b) *A stabilitás Fortes-féle kritériuma* [10]

Az alakváltozás stabil, ha a szomszédos keresztmetszetek hányadosa egyhez tart. Ez bekövetkezik, ha

$$\frac{\frac{\delta \dot{q}}{\dot{q}}}{\frac{\delta q}{q}} = \frac{\delta \ln \dot{q}}{\delta \ln q} \cong 1. \quad (41)$$

Ez utóbbi stabilitási kritérium előnye, hogy közvetlen kapcsolatot ad az alakváltozás sebességével. (18) felhasználásával ugyanis

$$\frac{\delta \dot{e}}{\delta q} = -\frac{\dot{q}}{q^2} \left( \frac{\delta \ln \dot{q}}{\delta \ln q} - 1 \right). \quad (42)$$

Ezzel a (41) kritérium:

$$\frac{\delta \dot{e}}{\delta q} \cong 0. \quad (43)$$

Ennek szemléletes jelentése van. Ha  $\delta q > 0$ , akkor  $\delta \dot{e} > 0$ , azaz a stabilitáshoz a nagyobb keresztmetszetű részekben az alakváltozás sebessége nagyobb kell legyen.

4.1.1. *Mechanikai hibák*

Vizsgáljuk meg a (40), (41) stabilitási kritériumokat mechanikai hibát tartalmazó, geometriailag tökéletes ( $dq_0/dx=0$ ) próbatestekre. A (38) egyenletből ekkor

$$\gamma + m \cong 1 \quad (44)$$

a Hart-féle, és

$$\gamma \cong 1 \quad (45)$$

a Fortes-féle kritérium esetén. Mindkét feltétel az alakítási sebességre érzéketlen anyagokra ( $m=0$ ) a Considère-kritériumot adja. Nyilvánvaló, hogy a fenti feltételek megadásához a hiba természetének pontos figyelembevétele is szükséges [10].

4.1.2. *Szuperplaszticitás*

Eredményeink alapján egy egyszerű feltételt adhatunk a szuperplasztikus viselkedésre. Tegyük fel, hogy  $\gamma$  és  $m$  állandó. Akkor (38) integrálásával ( $dq_0/dx=0$ ):

$$\dot{q} = C q^{\frac{\gamma+m-1}{m}}, \quad (46)$$

ahol  $C$  integrálási állandó. Legyen most a vizsgált anyag olyan, hogy a (44) feltétel az alakváltozás során  $\gamma+m=1$  alakban teljesül. (46) szerint egy ilyen anyagnál a keresztmetszet-változás sebessége független a keresztmetszettől, ami azt jelenti, hogy befűződés nem lép fel. Az ilyen anyagon rendkívül nagy alakváltozások érhetők el törés nélkül.



#### 4.1.3. Geometriai hibák

A geometriai hibáknak a stabilitásra jelentős hatásuk van [9,11]. Ha  $dq_0/dx \neq 0$ , akkor pl. a Hart-féle kritérium (44) helyett (38)-ból a következő lesz:

$$\gamma \equiv \frac{1-m}{1 - \frac{\delta \ln q_0}{\delta \ln q}}. \quad (47)$$

Ilyenkor a stabilitási kritérium tehát nem adható meg egyértelműen a  $\gamma, m$  paraméterekkel, hanem jelentős szerepe lesz a minta kezdeti állapotának. Mivel az alakváltozás kezdetén  $\delta \ln q = \delta \ln q_0$ , ezért az alakváltozás stabilitásához ekkor extrém nagy  $\gamma$ -ra (alakítási keményedési sebességre) van szükség, kivéve azt az esetet, amikor  $m \cong 1$  (Newton-folyadék). Jól hőkezelt polikristályos anyagoknál az alakítás kezdetén általában  $\gamma \gg 1$ , ezért van az, hogy a megmunkálási hibák ellenére az alakváltozás stabilis lehet.

#### 4.1.4. Stabilitási feltételek a maximális erő alapján

Az előzőekben megfogalmazott stabilitási feltételek hasznosak, de makroszkopikusan nem teljesen kielégítőek. Ugyanis ezek alapján felléphetnek olyan lokális instabilitások, amelyek a további alakváltozás során megszűnhetnek annak ellenére, hogy a hiba (pl. lokális kontrakció) a környezethez képest növekszik. Makroszkopikus szempontból nyilvánvalóan stabilnak tekinthető az alakváltozás mindaddig, amíg növekvő erő hatására jön létre.

Geometriailag tökéletes mintáknál két esetben a (22) összefüggésből egyszerű stabilitási feltétel adható a  $\dot{P} \geq 0$  alapján. Ha az alakítási sebesség ( $\dot{\epsilon}$ ) állandó, akkor (22)-vel

$$\gamma \geq 1,$$

ami éppen a Considère-feltétel.

A gyakorlatban legtöbbször megvalósuló esetben azonban a nyújtási sebesség állandó, azaz  $\dot{\epsilon} = 0$ , amivel

$$\gamma - m \geq 1.$$

#### IRODALOM

1. A. Considère, Ann. Ponts Chaussées 9, 574, 1885.
2. U. F. Kocks, A. S. Argon and M. R. Ashby: Thermodynamics and Kinetics of Slip, Progress in Materials Science, Vol. 19. Pergamon Press, Oxford, 1975.
3. Kovács I., Magyar Fizikai Folyóirat, 25, 113, 1977.
4. E. W. Hart, Acta Met. 15, 351, 1967.
5. E. W. Hart, Acta Met. 18, 599, 1970.
6. G. A. Korn és T. M. Korn: Matematikai Kézikönyv Műszakiaknak, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1975. p. 270.
7. E. W. Hart, C. Y. Li, H. Yamada and G. L. Wire: Constitutive Equations in Plasticity, ed. A. S. Argon, MIT Press, Massachusetts, 1975. p. 149.
8. J. J. Jonas, R. A. Holt and C. E. Coleman, Acta Met., 24, 916, 1976.
9. J. J. Jonas and B. Baudalet, Acta Met., 25, 43, 1977.
10. M. A. Fortes, Int. J. Mech. Sci. 19, 483, 1977.
11. A. K. Ghosh, Acta Met. 25, 1413, 1977.





# A KÉPLÉKENY ALAKÍTÁS VIZSGÁLATI MÓDSZEREI

## 2. AZ ÖSSZENYOMÁS

RAJKOVITS ZSUZSA

ELTE, Általános Fizika Tanszék

### TARTALOM

1. Bevezetés .....	15
2. A nyomóvizsgálat jellemzői .....	15
3. A súrlódási erő hatását kiküszöbölő módszerek .....	18
4. A nyomóvizsgálatra jellemző paraméterek .....	19
5. A nyomóvizsgálat során jelentkező instabilitások .....	19
5.1. A Hart-féle instabilitási feltétel az összenyomási deformációra .....	20
5.2. Az instabilitás forrásai .....	21
6. Irodalom .....	22

### 1. Bevezetés

A szakítóvizsgálatokban nem kapunk az anyag minden mechanikai sajátosságáról kellően részletes felvilágosítást. A nyújtási vizsgálatok jól kiegészíthetők nyomóvizsgálatokkal, amelyek során szintén egytengelyű feszültségállapot alakul ki. Az összenyomás során nagyobb képlékeny alakváltozások érhetők el, ezért ilyenkor a plasztikus tulajdonságok nagyobb deformációtartományban vizsgálhatók.

### 2. A nyomóvizsgálat jellemzői

A vizsgálat során a henger vagy hasáb alakú  $q_0$  kezdeti keresztmetszetű próbatestet a  $P$  terhelőerő (vagy  $\sigma = \frac{P}{q_0}$  feszültség) hatására a kezdeti  $h_0$  magasságról  $h < h_0$  magasságúra deformáljuk. A nyomóvizsgálat görbéje, a nyomódiagram az 1. ábrán látható.

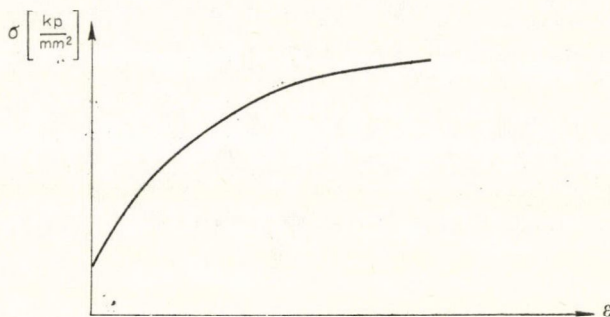
Az összenyomás mértékét jellemző paraméter, az

$$\varepsilon = \frac{h_0 - h}{h_0} \quad (1)$$

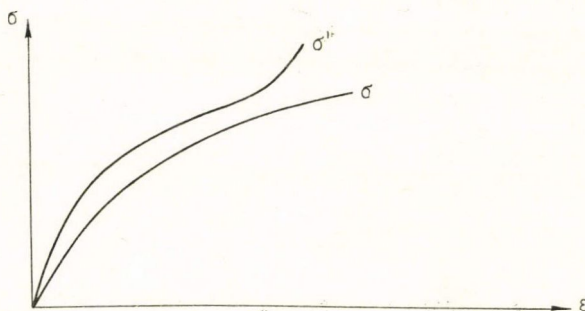
a próbatest relatív rövidülése. A nyomódiagramokon a pillanatnyi feszültség és relatív rövidülés összetartozó értékei olvashatók le.

A szokványos anyagvizsgáló berendezések a *terhelőerő* és rövidülés grafikonjait rajzolják ki. Ebből a grafikonból a nyomódiagram kétféle módon szerkeszthető meg. Az egyik eljárásnál a  $\sigma'$  mérnöki feszültséget a pillanatnyi terhelőerő és a  $q_0$  kezdeti keresztmetszet hányadosával adjuk meg, míg a másik eljárásnál a  $q$  pillan-





1. ábra. Feszültség—deformáció összefüggés

2. ábra. Feszültség—deformáció összefüggés,  
valódi feszültség, mérnöki feszültség

natnyi keresztmetszet felhasználásával a  $\sigma$  valódi feszültséget adjuk meg. A minden-kori keresztmetszetre vonatkoztatott feszültség tehát kisebb a mérnöki feszültségnél (2. ábra). A valódi és mérnöki feszültség egyértelmű kapcsolatban van egymással. Az összefüggés megállapítható, ha figyelembe vesszük azt, hogy a minta térfogata a deformáció során jó közelítéssel állandó, azaz

$$q_0 h_0 = q h. \quad (2)$$

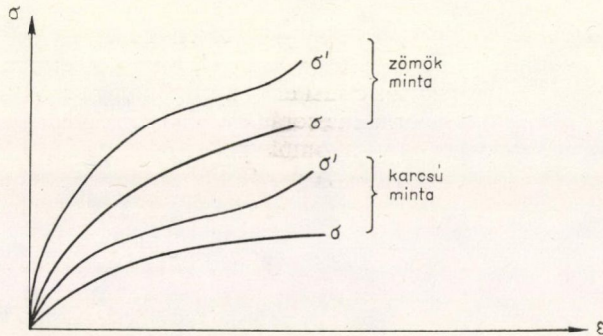
Az (1) összefüggés felhasználásával

$$\sigma = \sigma' (1 - \epsilon) \quad (3)$$

adódik. A  $\sigma$  görbe a  $\sigma'$  görbe alatt halad a nyomódiagramon (2. ábra).

A nyomódiagram alakját több tényező befolyásolja. Az *anyag minőségétől* függő különbségek mellett jelentős hatása van *a minta kezdeti  $d_0$  átmérőjének és  $h_0$  magasságának*. A kezdeti minta átmérő és magasság arány értéke szerint ún. zömök, illetve karcsú mintákat különböztetünk meg. A 3. ábra egy

$$\frac{d_0}{h_0} = 3 \quad (4)$$



3. ábra. A feszültség—deformáció összefüggés kapcsolata a minta alakjával

paraméterrel jellemzett zömök és egy

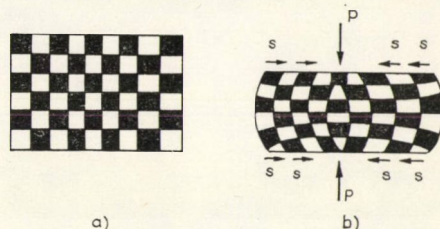
$$\frac{d_0}{h_0} = 0,5 \quad (5)$$

paraméterű karcsú minta nyomódiagramját mutatja.

A 3. ábrán a valódi feszültségeket is feltüntettük. Fémek törésig vagy nagymértékű képlékeny alakváltozásig folyó vizsgálatához olyan kör keresztmetszetű mintákat használnak, melyeknél a kezdeti minta magasság és átmérő aránya  $h_0:d_0=3:1$ . Nyomóvizsgálattal történő kismértékű alakváltozáshoz viszont a  $h_0=25 d_0$  kezdeti magasság és átmérőviszony alkalmazása az optimális [1]. A 3. ábráról leolvasható, hogy a zömökebb minta ugyanolyan alakváltozáshoz nagyobb  $\sigma'$  és  $\sigma$  érték tartozik. Az összenyomási deformációra döntő hatása van a minta és a deformáló feltét felülete között ható *súrlódási erőnek*.

A deformálás folyamán az érintkező felületek között fellépő súrlódási erő hatása jól szemléltethető a 4. ábrán látható módon. A 4a) ábra a deformálás előtti állapotot mutatja, míg a 4b) ábra az  $\varepsilon=1/3$ -dal való összenyomás utáni állapotnak felel meg. A b) alakra a hordószerűség jellemző, a rajzolat hossz- és keresztirányú vonalai a henger hossz- és keresztirányú metszeteiben arról tanúskodnak, hogy az egész próbatest térfogatában végbemenő alakváltozás eloszlása egyenlőtlen. A próbatest keresztmetszetének növekedése (duzzadása) magasságának közepén lényegesen nagyobb, mint a homlokfelületeken. Ezt a jelenséget a súrlódási erő jelenléte magyarázza.

Így tehát a tulajdonképpeni  $P$  nyomóerőn kívül — amely a próbatest tengelyének irányában hat —, a próbatest felületein, a tengelyre kereszt irányban működő  $S$  súrlódási erők is fellépnek. Az  $S$  erők fékezik a próbatest véglapjainak keresztirányú alakváltozását. Rövidebb próbatestnél az  $S$  súrlódási erők hatása nagyobb.



4. ábra. A súrlódási erő szerepe a henger alakú minta deformálásában a) az alakítás előtti állapot; b) az alakítás utáni állapot,  $S$  súrlódási erő,  $P$  nyomóerő



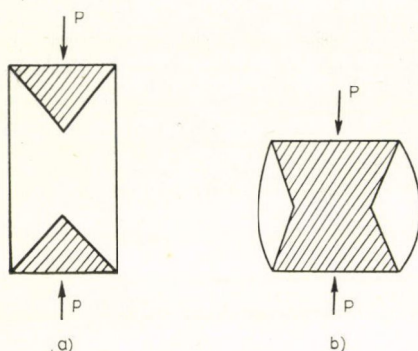
A nyomóvizsgálat eredményét tehát jelentősen befolyásolja az  $S$  súrlódási erő nagysága. A nyomófejek fényesre polírozásával, a minta deformálásra való megfelelő előkészítésével, kenéssel a súrlódási erők a minimálisra csökkenthetők. Ennek eredményeképpen a minta a deformálás során megtarthatja eredeti alakját.

A súrlódási erő jelenléte ún. nyomókúpok kialakulásához vezet (5. ábra).

A nyomókúpok abban különböznek a minta többi részétől, hogy bennük alakváltozás szinte nem észlelhető.

A nyomókúpok kialakulásával a különböző alakú (zömök, karcsú) minták deformálásánál észlelt különbségek is értelmezhetők.

Karcsú minta összenyomását elképzelhetjük oly módon, hogy a nyomókúp csúcsai közelednek egymáshoz a deformáció során. A keményebb nyomókúpokat kell a lágyabb anyagba nyomni (5. ábra), míg zömök minta esetén a deformálás során a keményebb nyomókúpokat egymásba kell nyomni, mely nagyobb erő alkalmazását igényli ugyanolyan alakváltozás létrehozásához [2].



5. ábra. Nyomókúpok a) karcsú, b) zömök mintában

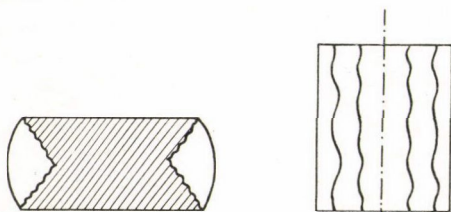
### 3. A súrlódási erő hatását kiküszöbölő módszerek

Az a körülmény, hogy a hengeres próbatest az összenyomás után hordószerű alakot ölt, s a képlékeny alakváltozás eloszlása a keresztmetszeteken egyenlőtlen, továbbá, hogy a lineáris összenyomódást a minta homlokléfelületeire ható súrlódási erők eltorzítják, megnehezíti a fémekben a képlékeny alakváltozással szemben fellépő tényleges ellenállás mértékének meghatározását.

Az összenyomódási deformáció során észlelt hordósodás kiküszöbölhető, ha a

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{S}{P} = \mu \quad (6)$$

összefüggésnek megfelelő szögben kiképzett nyomófejeket alkalmaznak, ahol  $\mu$  a súrlódási együttható. A súrlódási erőt csökkentve a minta az egész vizsgálat alatt megtartja hengeres alakját. Rideg és nem képlékeny anyagokból készült mintáknál ilyenkor lényegesen csökken a törési szilárdság, sőt a törés jellege is megváltozik. Míg a súrlódási erő jelenléte esetén a törés a nyomókúpok és a deformált anyag határán jelenik meg repedések formájában (6a) ábra), addig a súrlódási erőt kellően lecsökkentve, a minták hosszirányú, a minta egész magasságára kiterjedő repedések mentén törnek (6b) ábra).

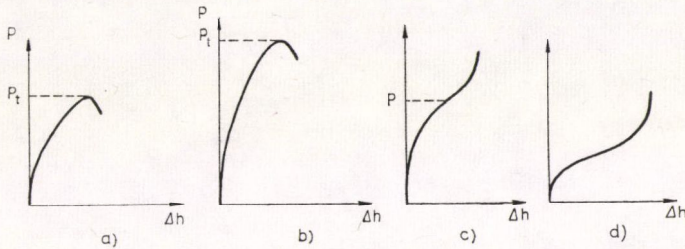


6. ábra. Repedések kialakulása a) zömök minta esetén a nyomókúpok mentén, b) homogén deformáció esetén



#### 4. A nyomóvizsgálatra jellemző paraméterek

Rideg anyagok nyomóvizsgálata során a bekövetkező törés miatt a törőszilárdság megállapítható. Szívós és nagy képlékenységű anyagoknál azonban ezzel a vizsgálattal nem lehet törést elérni. Különböző típusú anyagok erő-rövidülés diagramjai a 7. ábrán láthatók.



7. ábra. Különböző fémek anyagok diagramjai  
a) öntöttvas, b) nemesített acél, c) lágyacél, d) ólom esetén

Az anyagok nyomóvizsgálatára jellemző paramétereket általában a diagram egy-egy pontjával adhatunk meg.

Lágy és képlékeny anyagok esetén az anyag jellemzésére pl. a 10%-os rövidüléshez tartozó erő és az eredeti minta keresztmetszettel számolt feszültséget használják (7d) ábra). Szívós és képlékeny anyagoknál viszont az inflexiós pontnak megfelelő feszültség a jellemzőbb (7c) ábra) [3].

#### 5. A nyomóvizsgálat során jelentkező instabilitások

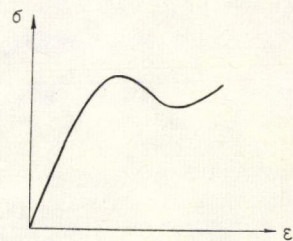
Az alakítás általános leírása után a kompresszió során jelentkező képlékeny instabilitásokkal foglalkozunk. A különböző anyagokra vonatkozó  $\sigma-\varepsilon$  görbe alakja általában az 1. ábrán látható formájú. Vannak azonban olyan anyagok, amelyeknél a 8. ábrán látható görbe jellemzi a  $\sigma-\varepsilon$  összefüggést.

A növekvő alakváltozással észlelt feszültségcsökkenés az ún. deformációs lágyulás következménye. Ezt a jelenséget az alakváltozás instabilitásának megjelenésével értelmezhetjük.

Az alakváltozási instabilitásokra Hart végzett részletes elemzést 1967-ben megjelent dolgozatában [4]. Az analízis nyújtási deformáció során mechanikai hibák hatására megjelenő instabilitásokra vonatkozott (1. fejezet).

Campbell [5] az előző analízist geometriai hibák bevezetésével továbbfejlesztette.

Jonas és munkatársai kiterjesztették a nyújtási deformációra kapott eredményeket összenyomásra is [6]. Bevezettek újabb stabilitási kritériumokat, s kifejlesztettek egy grafikus módszert, mellyel az instabilitás kezdete és befejeződése meghatározható.



8. ábra. Feszültség—deformáció összefüggés alakítási lágyulás esetén



A nyújtásnál megismert Considère és Hart-féle analízis (1. fejezet) az összenyomási deformációra is megadja az instabilitás kezdetét, illetve az instabilitás tartományát.

A nyújtási deformációnál bevezetett Considère-féle instabilitási feltétel általában nem alkalmazható az összenyomásra, mert összenyomási deformációnál gyakran előfordul, hogy a vizsgálat alatt az anyag nem keményedik, hanem deformálási lágyulás lép fel. A Considère-féle feltételben pedig a  $\gamma$  alakítási keményedési együttható pozitív.

### 5.1. A Hart-féle instabilitási feltétel az összenyomási deformációra

A Hart-analízis eredménye (1. fejezet) a

$$\frac{\dot{P}}{P} = -\frac{l}{l} (1 - \gamma + m) + \frac{\ddot{l}}{l} m \quad (7)$$

és a

$$\left( \frac{q}{\dot{q}} \frac{\delta \dot{q}}{\delta q} \right)_P = \frac{\gamma - (1 - m)}{m} \quad (8)$$

egyenletekkel adható meg, ahol  $P$  a deformáló erő,  $m$  a sebességérzékenység,  $\gamma$  az alakítási keményedési együttható,  $l$  és  $q$  pedig a minta hossza, illetve keresztmetszete.

Az összenyomási deformáció általában állandó nyomófejssebesség mellett folyik, ezért erre az esetre célszerű megadni az instabilitási feltételeket. Állandó nyomófejssebesség ( $\ddot{l}=0$ ) esetén a (7), (8) egyenletekből látható, hogy a terhelés maximumát a

$$\gamma = 1 + m \quad (9)$$

összefüggés szabja meg.

Az összenyomási deformáció másik módja, ha a deformálás állandó valódi deformációsebességgel történik. (Az előző módszernél sokkal nehezebben kivitelezhető módszer.) Az állandó valódi deformálási sebességet az

$$\frac{\dot{l}}{l} = \frac{\ddot{l}}{l} = \text{állandó} \quad (10)$$

összefüggéssel adhatjuk meg (1. fejezet).

Ismét a (7), (8) egyenletek felhasználásával juthatunk el az instabilitási kritériumokhoz. A terhelés maximumát most a  $\gamma=1$  összefüggéssel adhatjuk meg.

A kompressziós vizsgálat analíziséhez célszerű egy előjelkonvenciót bevezetnünk. Amennyiben a  $P, \sigma, \varepsilon, \dot{\varepsilon}, \dot{l}$  mennyiségeket *negatív*, az  $m, q, \dot{q}, l$  mennyiségeket *pozitív* előjellel látjuk el, úgy a nyújtásra kapott Hart-féle egyenletek és instabilitási feltételek összenyomásra is alkalmazhatók.

Az alakítással lágyuló anyagoknál a  $\left( \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon} \right)$  mennyiség az alakváltozás kezdeti szakaszában pozitív, majd a lágyulási szakaszban negatív értéket vesz fel.

A (7), (8) egyenletekből az  $\ddot{l}=0$  esetben:

$$\left( \frac{l}{P} \frac{\delta P}{\delta l} \right)_i = \gamma - (1 + m). \quad (11)$$



Ebből adódik, hogy ha  $[\gamma - (1+m)] < 0$ , akkor az anyag az alakítással szemben stabil, és a  $[\gamma - (1+m)] = 0$  feltétel megadja az instabilitás kezdetét.

Hasonlóan kaphatjuk meg az instabil tartomány határait állandó deformálási sebesség mellett végzett összenyomási alakításra is. Ekkor a  $(\gamma - 1) < 0$  feltétel teljesülése jelenti a stabil terhelési tartományt [6].

Az előző ismeretek birtokában megadhatók grafikusán is az instabilitási tartományok. A 9. ábrán együtt ábrázoltuk a  $\sigma = \sigma(\epsilon)$ ,  $\frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon}$ , és a  $\gamma$  paraméterek valódi deformáció függését. Az ábra egy alakításra lágyuló anyag összenyomására vonatkozik. Az ábrából azt is láthatjuk, hogy felhasználva a  $\sigma - \epsilon$  grafikonból deriválással származtatott  $\frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon}$  görbét, valamint az alakítási keményedési együttható definíciós egyenletét,  $\gamma = \frac{1}{\sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon}$ -t, az ezekkel számított harmadik görbe segítségével kijelölhetjük a stabil és instabil folyás tartományát.

A 9. ábrán látható görbék állandó deformációsebesség ( $\dot{\epsilon} = \text{áll.}$ ) mellett végzett mérésre vonatkoznak. A  $\gamma = 1$ , illetve az  $m$  sebességérzékenységet is figyelembe vevő  $\gamma = 1 - m$  egyenesek jelölik ki az instabil folyás tartományait.

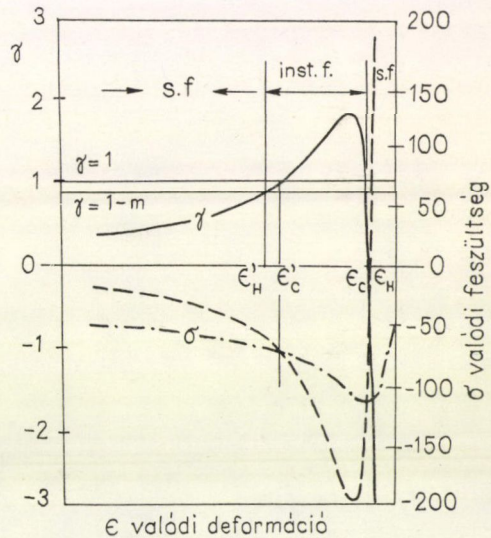
A  $\gamma = 1$  feltétellel kapott  $E_C - E'_C$  tartomány a Considère-analízis eredménye, míg a  $\gamma = 1 - m$  feltétellel megadott  $E_H - E'_H$  a Hart-féle értelmezésből született.

Azoknál az anyagoknál tehát, amelyek sebességérzékenysége nagyobb, kisebb deformációnál kezdődik az instabil tartomány, azaz a 9. ábrán  $E_H$  megelőzi  $E_C$ -t.

## 5.2. Az instabilitás forrásai

A szokásos  $\sigma - \epsilon$  görbétől való eltérést instabilitásokkal értelmezhetjük. Az instabilitás megjelenésének oka többféle lehet. A mechanikai előkészítés során előfordul, hogy a minta teljes méretében nem homogén, van olyan keresztmetszete, amelybe az elkészítés alatt valamilyen hiba került, pl. zárvány. Ennélfogva ez a keresztmetszet az összenyomáskor a többihez viszonyítva, eltérő módon viselkedik.

Gyakran tapasztalható az is, hogy a minta előkészítés eredményeként a keresztmetszet inhomogén lesz. Ezen végezve az alakítást, a keresztmetszetben inhomogén



9. ábra. Az instabilitási tartomány grafikus meghatározása,  $\sigma$ ,  $\frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon}$ ,  $\gamma = \frac{1}{\sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon}$ ,  $\rightarrow$  s. f.  $\leftarrow$  stabil folyás tartománya,  $\leftarrow$  inst. f.  $\rightarrow$  instabil folyás tartománya



tartomány deformációja eltér a többitől, ami az instabilitásra vezet. Az első hibát mechanikai, a másodikat geometriai hibának nevezzük.

Az instabil folyásra további lehetőség, ha figyelembe vesszük azt, hogy a deformációsebesség sem szükségképpen azonos a minta minden keresztmetszetén. A deformációsebességben jelentkező inhomogenitás hatása elnyomhatja az inhomogén keresztmetszet hatását [6].

#### IRODALOM

1. *Sapoznyikov*: Fémek mechanikai vizsgálata, Nehézipari Könyvkiadó, Budapest, 1952.
2. *Verő J.—Káldor M.*: Fémtan, Tankönyvkiadó, Budapest, 1977.
3. *Dr. Zorkóczy Béla*: Metallográfia és anyagvizsgálat, Tankönyvkiadó, Budapest, 1975.
4. *E. W. Hart*, *Acta Met.* 15, 351, 1967.
5. *J. D. Campbell*, *J. Mech. Phys. Solids*, 15, 359, 1967.
6. *J. J. Jonas, R. A. Holt and C. E. Coleman*, *Acta Met.* 24, 911, 1976.

# A KÉPLÉKENY ALAKÍTÁS VIZSGÁLATI MÓDSZEREI

## 3. A CSAVARÁS

TÓTH LÁSZLÓ

ELTE, Általános Fizika Tanszék

### TARTALOM

1. Bevezetés .....	23
2. A csavarás és nyújtás összehasonlítása .....	23
3. A csavarási deformációk kiszámítása .....	24
4. A csavarás mechanikai tulajdonságai .....	27
5. A csavarófeszültség meghatározása nagy plasztikus deformációnál .....	28
6. A csavarási törésfelületek típusai .....	31
7. A hosszúság változása .....	31
8. Kísérleti eredmények vékony falú csövek csavarásánál és nyújtásánál, kis deformációk esetén .....	32
9. Néhány kísérleti eredmény tömör minták csavarásánál nagy deformációk esetén .....	34
10. Egyidejű csavarás és nyújtás jellemzése ekvivalens nyújtó feszültséggel és deformációval .....	35
11. Irodalom .....	36

### 1. Bevezetés

A fémek tulajdonságainak vizsgálatában a csavarás nem olyan elterjedt vizsgálati módszer, mint a tiszta nyújtás. Ez az eljárás azonban jól használható a mérnöki gyakorlatban és a plaszticitás vizsgálatában is. Csavarást alkalmaznak több anyagi tulajdonság — nyírási modulus, csavarási folyási szilárdság, törési modulus — meghatározására. A csavarás általánosan elfogadott olyan anyagok vizsgálatánál, amelyek csavarási terhelésnek vannak alávetve, pl. oszlopok, tengelyek, csavarfűrészek esetén. Jól használható törékeny anyagok vizsgálatánál (szerszámacélok) és pl. magas hőmérsékletű csavarással következtetnek az anyagok kovácsolhatóságára is. Annak egyik oka, hogy a csavarási vizsgálat mégsem annyira elterjedt és standardizált, mint a tiszta nyújtás az, hogy már a deformációk kiszámítása is bonyolultabb, és általában összetett, inhomogén feszültségállapot hatására történik az alakváltozás.

### 2. A csavarás és nyújtás összehasonlítása

*Sauveur* [1] mutatott rá 1938-ban, hogy a csavarási vizsgálat jobban alkalmazható a fémek képlékeny alakítására, mint a nyújtás. A csavarási vizsgálatnál (a nyújtáshoz hasonlóan) egy feszültség—deformáció görbére van szükség. Csavarásnál ez a görbe minden komplikáció nélkül megkapható még több száz százalékos deformációs tartományban is, míg a nyújtásnál fellép a minta befűződésének jelensége, és 20—50%-os deformáció után az anyag eltörik.

Az I. táblázatban összefoglaljuk a csavarás és a nyújtás egymásnak megfelelő paramétereit [2].

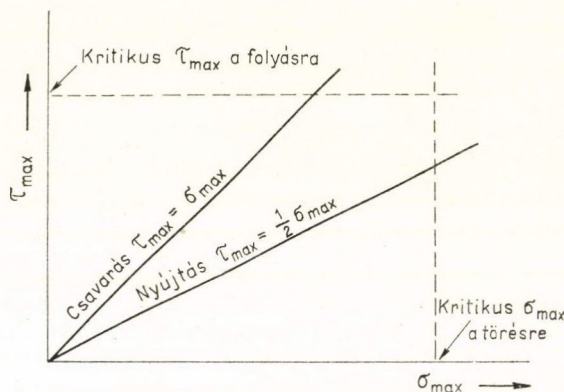


## I. TÁBLÁZAT

	Nyújtás	Csavarás
A feszültségtenzor elemei főtengelyrendszerben	$\sigma_1 = \sigma_{\max}; \sigma_2 = \sigma_3 = 0$	$\sigma_1 = -\sigma_3; \sigma_2 = 0$
Maximális nyírófeszültség	$\tau_{\max} = \frac{\sigma_1}{2} = \frac{\sigma_{\max}}{2}$	$\tau_{\max} = \frac{2\sigma_1}{2} = \sigma_1$
A deformációs tenzor elemei főtengelyrendszerben	$\varepsilon_1 = \varepsilon_{\max}; \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = -\frac{\varepsilon_1}{2}$	$\varepsilon_1 = \varepsilon_{\max} = -\varepsilon_3; \varepsilon_2 = 0$
Maximális nyírás	$\gamma_{\max} = \sin h \frac{3\varepsilon_1}{2}$	$\gamma_{\max} = \varepsilon_1 - \varepsilon_3 = 2\varepsilon_1$
Ekvivalens nyújtófeszültség	$\bar{\sigma} = \sigma_1$	$\bar{\sigma} = \sqrt{3}\sigma_1$
Ekvivalens nyúlás	$\bar{\varepsilon} = \varepsilon_1$	$\bar{\varepsilon} = \frac{2}{\sqrt{3}}\varepsilon_1 = \frac{\gamma}{\sqrt{3}}$

Ez az összehasonlítás mutatja, hogy  $\tau_{\max}$  kétszer nagyobb csavarásnál, mint nyújtásnál. Ezt figyelembe is veszik törékeny anyagok vizsgálatakor a folyáshatár és a törési feszültség meghatározásánál (1. ábra).

A csavarásnál a kritikus  $\tau_{\max}$  plastikus folyásfeszültség elérhető a törés bekövetkezése nélkül, míg a nyújtásnál elérjük a törési feszültséget anélkül, hogy a plastikus folyás bekövetkezne. Jól nyújtható fémeknél is hasonló eredmény adódik: a plastikus deformáció mértéke sokkal nagyobb lehet csavarásnál, mint nyújtásnál.



1. ábra. A  $\tau_{\max}$ - $\sigma_{\max}$  összefüggés a deformálhatóság meghatározásához

### 3. A csavarási deformációk kiszámítása

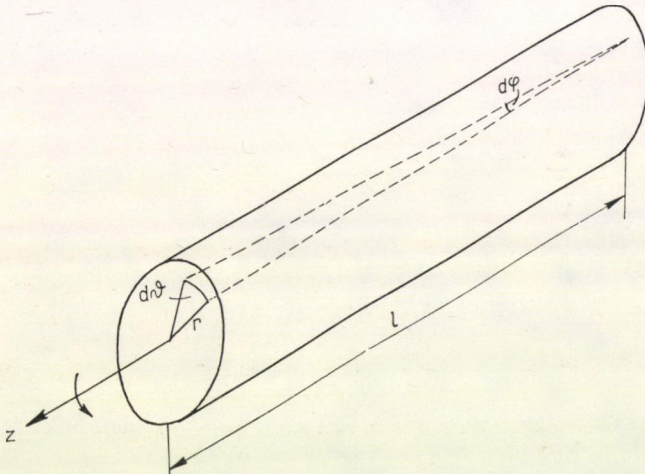
A csavaróberendezés általában hengerszimmetrikus a csavarás geometriájának megfelelően. Fő részei a befogó és a mérőfej, amelyekkel a külső forgatónyomatékok kifejtjük, illetve mérjük. A csavarási deformációt a minta egyik végének a másikhoz képesti szögelfordulásából lehet számolni. A vizsgált minta általában egy polikris-

tályos fémrúd, amelynek csavarása folyamán szükségképpen nyúlás is fellép. Ez szintén mérhető, és szerepet játszik a deformációk kiszámításánál is. Tekintsünk egy tömör, henger alakú, homogén és izotrop mintát (2. ábra). A rúd  $r$  sugarú helyén a nyírási (csavarási) deformáció:

$$d\gamma_t = \operatorname{tg} d\varphi = \frac{r d\vartheta}{l}. \quad (1)$$

A minta rugalmas csavarásánál az  $l$  hossz és a keresztmetszet lényegesen nem változik, így a rugalmas csavarási deformáció véges elcsavarásnál:

$$\gamma_{t \text{ rug}}(r) = \int_0^{\vartheta_{\text{rug}}} \frac{r d\vartheta'}{l} = \frac{r \vartheta_{\text{rug}}}{l}. \quad (2)$$



2. ábra. Csavarási deformáció homogén rúd tiszta nyírásánál

Az  $a$  sugarú minta kerületén:

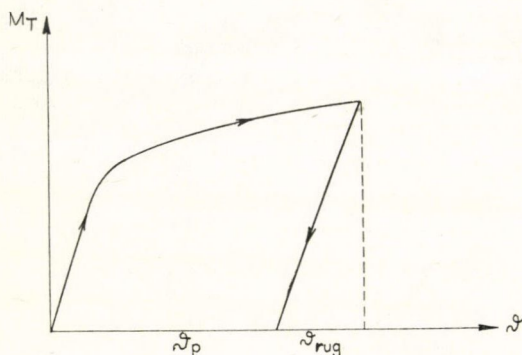
$$\gamma_{t \text{ rug}} = \frac{a \vartheta_{\text{rug}}}{l}. \quad (3)$$

Elegendően nagy külső forgatónyomaték esetén a minta maradó alakváltozást szenved. Legyen a plasztikus elcsavarodás szöge:  $\vartheta(r)$ . Ez úgy mérhető, ha a mintát tehermentesítjük; a visszacsavarodás szöge a rugalmas, a maradék pedig a plasztikus elcsavarodás (3. ábra).

A maradó alakváltozás során fellépő nyúlás miatt az (1) összefüggésben most  $l$  is változó, és a plasztikus elcsavarodás szöge függ a sugártól:

$$d\gamma_t(r) = \frac{r \vartheta(r)}{l(r)}. \quad (4)$$





3. ábra. A rugalmas és plasztikus csavarás szögének meghatározása tehermentesítéssel

Mivel  $\vartheta(r)$  csak a minta szélén mérhető, ezért itt számoljuk ki a makroszkopikus csavarási deformációt:

$$\gamma_{ta} = \int_0^{\vartheta_a} \frac{a(\vartheta') d\vartheta'}{l(\vartheta')}. \quad (5)$$

Az (5) kifejezés integranduszának sorfejtésével és integrálással a következő kifejezésre jutunk:

$$\gamma_{ta} = \frac{a_0}{l_0} \vartheta_a \left( 1 - \frac{3}{4} \frac{\Delta l}{l_0} \right), \quad (6)$$

ahol  $a_0, l_0$  a minta kezdeti sugara, illetve hossza és  $\Delta l$  a  $\vartheta_a$  plasztikus csavaráshoz tartozó megnyúlás. (6)-

ban felhasználtuk, hogy a képlékeny alakváltozás folyamán a minta térfogata gyakorlatilag nem változik, azaz  $l_0 a_0^2 = l a^2$ . Ha  $\vartheta_a$  jóval nagyobb  $2\pi$ -nél, értékét a plasztikus csavarások számával fejezzük ki:

$$\vartheta_a = 2\pi n. \quad (7)$$

$\gamma_{ta}$  a (6) egyenletben a tiszta csavarási deformációt jelenti. Azonban a minta megnyúlása is hozzájárul az összes nyíráshoz, mégpedig  $\varepsilon$  nyúlási deformáció  $\sqrt{3}\varepsilon$  nyírással egyenértékű [3], így a minta szélén a teljes makroszkopikus nyírás:

$$\gamma_a = \gamma_{ta} + \sqrt{3}\varepsilon. \quad (8)$$

A teljes makroszkopikus nyírási deformációt kell használnunk pl. az alakítási keményedés vizsgálata során [4].

A plasztikus csavarás folyamán a minta keresztmetszetében az alakváltozás mértéke változó, így az átlagos csavarási deformációt csak  $\vartheta(r)$  ismeretében tudjuk megadni. Erre vonatkozóan Grewe és Kappler [5] végzett méréseket; eszerint

$$d\gamma_t = \frac{r}{a} d\gamma_{ta}. \quad (9)$$

(9)-et felhasználva a minta keresztmetszetére vonatkozó átlagolással az átlagos deformáció:

$$d\bar{\gamma}_t = \frac{2}{3} \frac{a d\vartheta_a}{l}. \quad (10)$$

#### 4. A csavarás mechanikai tulajdonságai

Egy fémrúd rugalmas elcsavarásánál egyensúlyi helyzetben a külső forgatónyomaték egyenlő a belső nyírófeszültségek által kifejtett forgatónyomatékkal (4. ábra). A nyírófeszültség a minta közepében nulla, és lineárisan növekszik a sugár mentén. Ezért a külső forgatónyomaték:

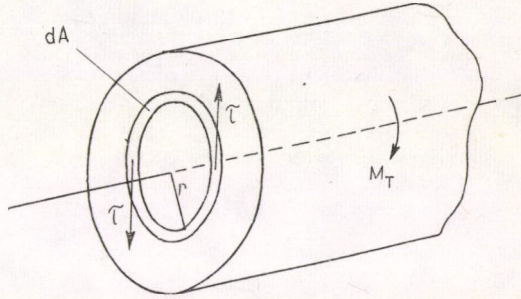
$$M_T = \int_{r=0}^{r=a} \tau r dA = \frac{\tau}{r} \int_0^a r^2 dA$$

$\int r^2 dA = J$  „tengelynyomaték” bevezetésével:

$$M_T = \frac{\tau \cdot J}{r}, \quad (11)$$

amiből

$$\tau = \frac{M_T \cdot r}{J}. \quad (12)$$



4. ábra. A belső nyírófeszültségek egyensúlyt tartanak a külső forgatónyomatékkal

Kör keresztmetszetű rúd esetén:

$$J = \frac{\pi a^4}{2}.$$

Ezzel a maximális nyírófeszültség:

$$\tau_{\max} = \tau_a = \frac{2M_T}{\pi a^3}. \quad (13)$$

A csavarási vizsgálat eredményeinek kiértékelését általában megnehezíti az a tény, hogy a minta keresztmetszetében a nyírófeszültség sugárfüggő. Ezért gyakran cső alakú mintát használnak a feszültség gradiens elkerülése érdekében. A (13) összefüggés cső alakú mintára a következő:

$$\tau_a = \frac{16M_TD_1}{\pi(D_1^4 - D_2^4)}. \quad (13a)$$

ahol  $D_1$  a külső,  $D_2$  a belső átmérő. Nem lehet azonban a fal vastagságát akárannyire lecsökkenteni, mert elgyengül és inkább kihajlik, gyűrődik, mintsem csavarodik. A tapasztalat szerint a nyírási rugalmassági határ és a nyírási modulus meghatározásához a hossz kb. 10-szer legyen nagyobb az átmérőnél, és az átmérő-falvastagság arány 8–10 között lehet [2].

A rugalmasság határán belül a nyírófeszültség a nyírási deformációval arányosnak tekinthető;  $\tau = \mu \gamma_{\text{rug}}$ . (3) és (12) felhasználásával a nyírási rugalmassági modulus a következőképpen fejezhető ki a minta geometriai tényezőinek, a forgatónyomatéknak, és a csavarási szögnek a függvényében:

$$\mu = \frac{M_T l}{J \vartheta_{\text{rug}}}. \quad (14)$$



A képlékeny alakváltozás a rugalmassági határ elérése után kezdődik. Általában  $\gamma_t = 0,002$  maradó deformációnál tekintik a képlékeny szakasz kezdetét. Mihelyt a nyírási folyáshatárt felülmúlta a nyírófeszültség, kérdésessé válik a (13) összefüggés alkalmazhatósága. Ezt vizsgáljuk a következőkben.

### 5. A csavarófeszültség meghatározása nagy plasztikus deformációnál

A folyáshatáron túl a nyírófeszültség a rúd keresztmetszetében már nem arányos a sugárral, így a rugalmas esetre alkalmazott gondolatmenet itt már nem érvényes. A következőkben először a Nádai-féle módszert ismertetjük [6]. A hosszegységre vonatkoztatott csavarási szög ( $\theta = \vartheta/l$ ) bevezetésével az (1) egyenlet szerint a csavarási deformáció:

$$\gamma = r\theta. \quad (15)$$

Nádai a továbbiakban két feltevést tesz: 1. A  $\theta$  szög független a sugártól, azaz a plasztikus deformáció arányos a sugárral. Ezt megerősítik Grewe és Kappler vizsgálatai is [5]. 2. A nyírófeszültség csak a nyírási deformáció függvénye:

$$\tau = f(\gamma). \quad (16)$$

A minta keresztmetszetére kifejtett forgatónyomaték:

$$M_T = 2\pi \int_0^a \tau r^2 dr. \quad (17)$$

Felhasználva a (15), (16) összefüggéseket és  $r$  helyett  $\gamma$  szerinti integrálást bevezetve, a következőre jutunk:

$$M_T \theta^3 = 2\pi \int_0^{\gamma_a} f(\gamma) \gamma^2 d\gamma. \quad (18)$$

Ebben az egyenletben az integrálást  $\gamma_a$ -ig kell végezni, ahol  $\gamma_a = a\theta$ , a minta kerületéhez tartozó deformáció. (18)-at differenciálva  $\theta$  szerint:

$$\frac{d}{d\theta} (M_T \theta^3) = 2\pi a^3 \theta^2 f(a\theta). \quad (19)$$

A maximális nyírófeszültség a minta szélén érvényes,  $\tau_a = f(a\theta)$ , ezért

$$\frac{d(M_T \theta^3)}{d\theta} = 2\pi a^3 \theta^2 \tau_a,$$

azaz

$$3M_T \theta^2 + \theta^3 \frac{dM_T}{d\theta} = 2\pi a^3 \theta^2 \tau_a.$$

Ebből

$$\tau_a = \frac{1}{2\pi a^3} \left( \theta \frac{dM_T}{d\theta} + 3M_T \right). \quad (20)$$

A forgatónyomaték-csavarási szög görbe ismeretében a (20) egyenlet segítségével tehát  $\tau_a$  kiszámítható. Az 5. ábra mutatja a szükséges paramétereket.

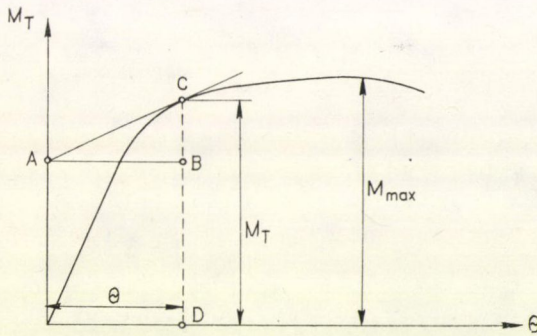
Az 5. ábrán látható jelölések segítségével a (20) egyenlet a következőképpen alakul:

$$\tau_a = \frac{1}{2\pi a^3} (BC + 3CD). \quad (21)$$

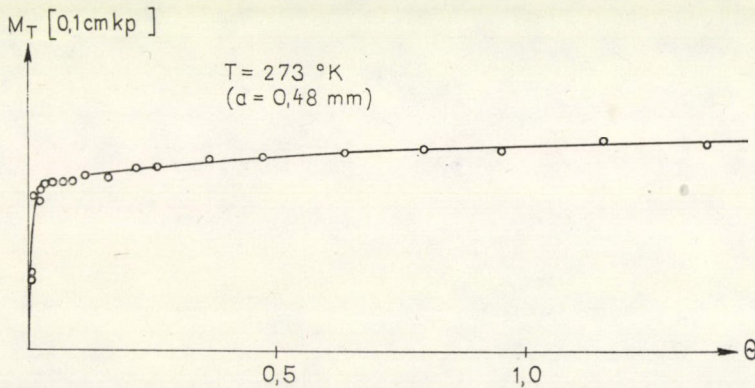
A maximális forgatónyomatéknál  $dM_T/d\theta = 0$ . Ebből definiálható egy végső torziós szilárdság, vagy más néven törési modulus:

$$\tau_u = \frac{3M_{\max}}{2\pi a^3}. \quad (22)$$

Egy konkrét forgatónyomaték-csavarási deformáció görbét látunk a 6. ábrán [7]. Cu-1%Co finomszemcsés polikristályos ötvözet csavarásának mérési eredménye. Megállapítható, hogy a BC szakaszok általában elhanyagolható járulékot adnak



5. ábra. A nyírófeszültség meghatározásához



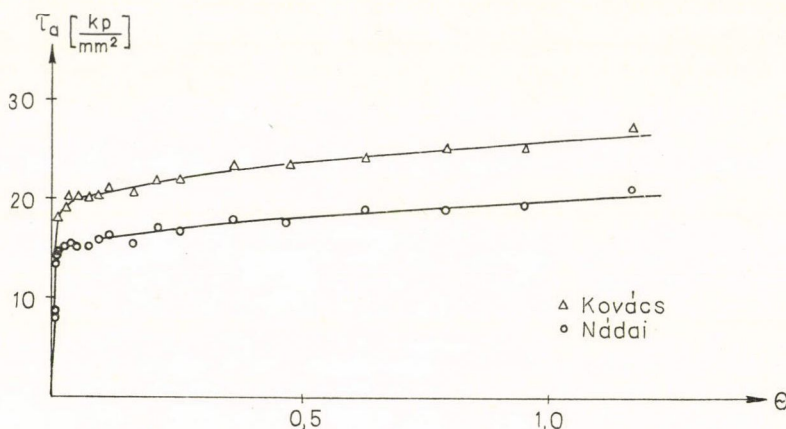
6. ábra. Polikristályos Cu-1%Co ötvözet forgatónyomaték-csavarási deformáció görbéje



a 3CD-hez képest, így a deriválás nélkül a (21)-et jól közelítő formula:

$$\tau_a \cong \frac{3M_T}{2\pi a^3}. \quad (23)$$

A (21) összefüggés segítségével számolt nyírófeszültséget mutatja a 7. ábra (0-jelöléssel). A másik görbe Kovács módszerének alapján készült [3]. Ez a módszer nem tesz feltevést arra vonatkozóan, hogy milyen a deformáció a minta belsejében. Ugyanis bármilyen nagy csavarási szögnél a fellépő forgatónyomaték rugalmas



7. ábra. A nyírófeszültség—plastikus csavarási deformáció görbe Nádai és Kovács módszerének összehasonlításához

feszültségektől származik, hiszen a képlékeny alakváltozás addig tart, amíg a keményedés következtében megnövekedett folyási feszültségek egyensúlyt nem tartanak a külső forgatónyomatékkal. Ebben az egyensúlyi helyzetben azonban már a rugalmas feszültségek működnek, tehát a (13) összefüggés segítségével lehet meghatározni a minta kerületéhez tartozó nyírófeszültséget. Az eredményt a következő gondolatmenettel lehet megfogalmazni: A (14) és (17) összefüggések alapján a külső forgatónyomaték a következő:

$$M_T(a, \vartheta_a) = \mu \frac{a^4 \varphi(\vartheta_a) \pi}{2l} = 2\pi \int_0^a \tau(r, \vartheta_a) r^2 dr, \quad (24)$$

ahol  $\varphi(\vartheta_a)$  az a rugalmas elcsavarodási szög, amelynél a belső rugalmas feszültségek egyensúlyt tartanak a külső forgatónyomatékkal. Nyilván ez a szög az alakítási keményedés következtében egyre nő. A (24) egyenlet mindkét oldalát differenciálva a szerint azt kapjuk, hogy

$$\frac{4\mu a^3 \varphi(\vartheta_a) \pi}{2l} = 2\pi \tau(a, \vartheta_a) a^2,$$

amiből (24) felhasználásával adódik a minta kerületéhez tartozó nyírófeszültség:

$$\tau(a, \vartheta_a) = \frac{2M_T}{\pi a^3}. \quad (25)$$

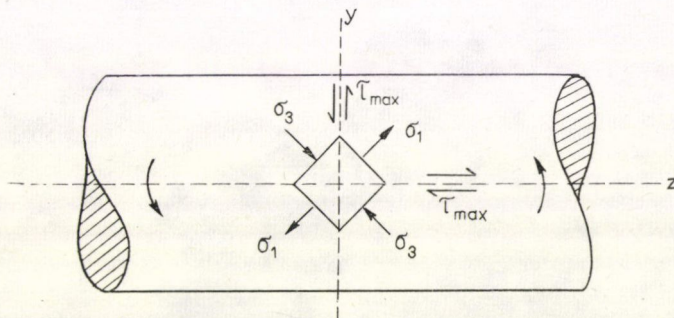


Az eredmény olyan, mintha a feszültség arányosan növekedne a sugárral (l. (13)). Azonban ez csak formai hasonlóság, (25) csak az anyag felületén érvényes, belül a feszültségeloszlás a felkeményedés következtében már nem lineáris [4].

A (25) alapján számolt nyírófeszültség mintegy 4/3-szor nagyobb mint a Nádai-féle. A (25) összefüggést igazolja azonban az, hogy ezzel a módszerrel az egytengelyű nyújtással egyenértékű eredményeket kaphatunk.

## 6. A csavarási törésfelületek típusai

Egy tiszta csavarással deformált rúd alakú mintában a feszültség tenzor fő-tengelyre transzformált kifejezésben csak a  $\sigma_1$  és  $\sigma_3$  különbözik nullától:  $\sigma_3 = -\sigma_1$ . A 8. ábra mutatja a feszültségeket egy csavarásra igénybevett fémrúd felületének egy pontjában.



8. ábra. Feszültségek csavarással deformált minta keresztmetszetében

A  $\sigma_1$  és  $\sigma_3$  feszültségekből adódóan két egymásra merőleges síkban maximális a nyírófeszültség; párhuzamosan a hossz tengellyel, illetve erre merőlegesen. A  $\sigma_1$  és  $\sigma_3$  feszültségek  $45^\circ$ -os szöget zárnak be a hossz tengellyel, így  $\tau_{max} = \sigma_1$ . A  $\sigma_1$  húzófeszültségként, a  $\sigma_3$  kompressziós feszültségként működik.

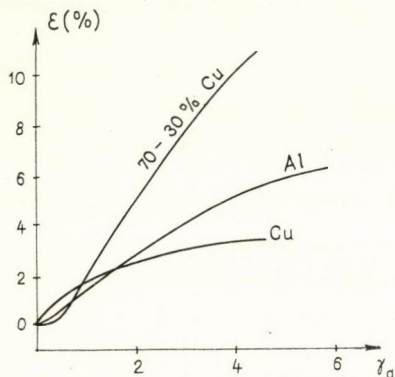
A csavarási törésfelületek különböznek a nyújtással kapottaktól. Jól alakítható fémeknél a törési felület egyike a maximális nyírófeszültségek síkjának. Általában a törési sík merőleges a hossz tengelyre. Törékeny anyagok esetén a törési felület a maximális húzófeszültség irányára merőleges, és így egy „kagyló” alakú, a hossz tengellyel  $45^\circ$ -os szöget bezáró törési felület alakul ki. Pl. szerszámacélok esetében a kísérletek eredménye az, hogy 720 Vickers keménységig a maximális nyírófeszültségű síkok egyike a törési felület, míg ezen érték fölött a nyújtófeszültségek felelősek a törés megindulásáért [2].

## 7. A hosszúság változása

Már előbb említettük, hogy a képlékeny csavarási deformáció folyamán mindig fellép nyúlás is. Ezt a jelenséget először *Pointing* figyelte meg 1912-ben [8], majd *MacGregor* 1933-ban végzett erre ismét kísérleteket. *Davis* a plasztikus deformáció után a mintát darabokra vágta, és megmérte a Vickers-keménységet a minta sugara



mentén [9]. Az eredmény az volt, hogy a fémrúd tengelyében a keménység olyan, mintha azt a tartományt csak tiszta nyújtással, vagy kompresszióval deformálták volna, a külső tartományok pedig erősen el vannak csavarodva. Ha nyújtófeszültség nincsen, a feszültségeknek a minta közepében el kell tűnniük, hiszen a  $\tau_0 = 0$ . Megállapítható, hogy a  $\tau = f(r\theta)$  feszültségeloszlás nem reprezentálja a teljes feszültség-rendszert nagymértékben deformált fémeknél, hanem másodlagos feszültségeket



9. ábra. A hosszúság változása erősen deformált Al, Cu, és 70—30%-os sárgaréz esetén

is tekintetbe kell venni tengelyirányban, radiálisan, sőt érintőlegesen is [6].

A képlékenyen megcsavart fémek maradó hosszváltozását könnyen megérthetjük, ha figyelembe vesszük az anyag szerkezeti felépítését [3]. Ugyanis polikristályos fémek maradó elcsavarásakor az egyes kristallitokban más-más csúszási rendszerek aktiválódnak, így az eredő deformáció szükségképpen tartalmaz hosszanti megnyúlást is. Természetesen fellépnek deformációk radiális irányban is, így tiszta csavarónyomaték alkalmazásakor a vékony és nem túlságosan finomszemcsés anyag hullámossá is válhat. Azonban kicsiny tengely menti feszültség (néhány  $\text{kp/mm}^2$ ) alkalmazása esetén is ez az effektus jelentéktelenné válik.

A nyúlás szemléltetésére a 9. ábrán láthatunk néhány eredményt [6].

Érdekes jelenség, hogy a forgatónyomaték irányának megfordításával a minta kicsit rövidül, majd ismét nyúlik. Ez az effektus a további forgatónyomaték oszcilláció után is megmarad [6] (10. ábra). Ezt a viselkedést is a kristály aggregátumok anizotrop viselkedésével magyarázhatjuk.

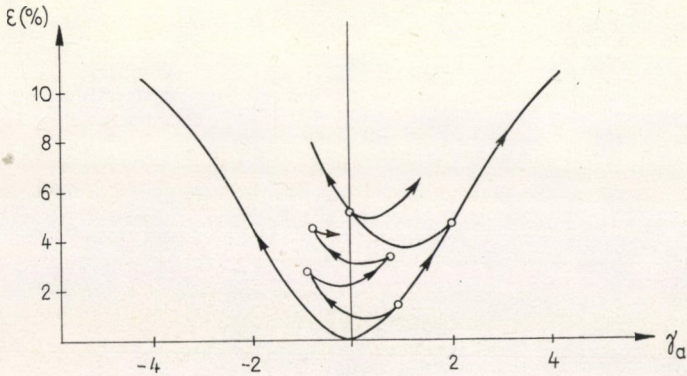
### 8. Kísérleti eredmények vékony falú csövek csavarásánál és nyújtásánál, kis deformációk esetén

Igen pontos méréseket végzett vékony falú csövek csavarására és nyújtására Daneshi és Hawkyard [10]. A mérőminta alakját a 11. ábra mutatja. A minta két vége négyszögletes volt, ezen keresztül fejtették ki a forgatónyomatékot, a csavarómozgást pedig a nyújtófeszültséget.

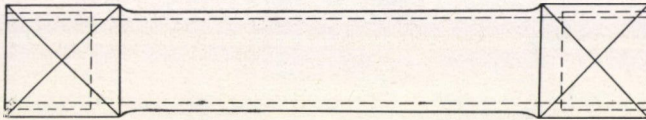
Vizsgálataikat polikristályos 99,8%-os Al és nagy tisztaságú Cu mintákon 292 és 78 K-on végezték. Mindkét hőmérsékleten meghatározták a feszültség-deformáció görbéket, amelyekből kettőt a 12—13. ábrán láthatunk.

Megállapítható, hogy mindkét hőmérsékleten a feszültségdeformáció görbe rugalmas része mind nyújtásra, mind csavarásra egybeesik. Ez az eredmény azt mutatja, hogy a rugalmas tulajdonságok csak kismértékben függenek a hőmérséklettől. A Cu esetében (12. ábra) az arányossági határ magasabb, 78, mint 292 K-on, az Al-nál ez nem látszik olyan egyértelműen. A 14. ábrán az alkalmazott deformálási módot láthatjuk. Először tiszta nyújtást alkalmaztak, majd a nyírófeszültség növelésével érték el a folyáshatárt.

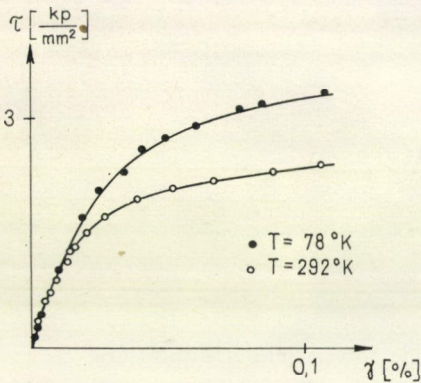




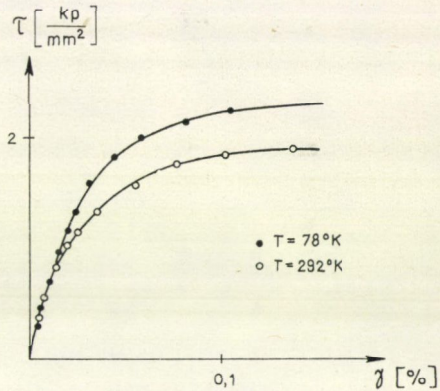
10. ábra. A forgatónyomaték irányváltása esetén kezdetben rövidülés lép fel



11. ábra A mérőminta alakja



12. ábra. Nyírófeszültség-csavarási deformáció görbe Cu-re



13. ábra. Nyírófeszültség-csavarási deformáció görbe Al-ra

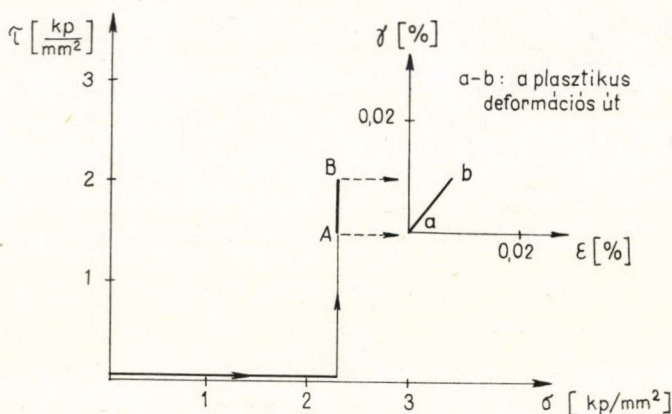
Ugyanezen az ábrán látható az  $\varepsilon - \gamma_a$  deformációs görbe. A folyáshatárnak megfelelő feszültséget az  $\varepsilon = \frac{1}{2} \gamma = 0,001$  maradó deformációknál vették.

A mérési eredmények segítségével megvizsgálták a Mises-féle folyásfeltétel érvényességét (15. ábra), amely egy kezdetben homogén és izotrop anyagra a következő [4]:

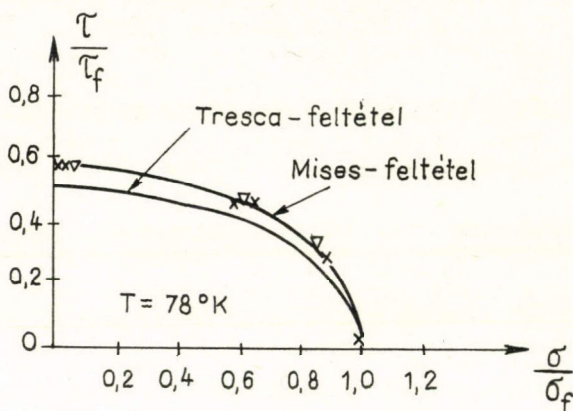
$$(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2 = 6\tau_f^2 = 2\sigma_f^2. \quad (26)$$

Itt  $\tau_f$  a tiszta nyírás,  $\sigma_f$  a tiszta nyújtás folyáshatára.





14. ábra. A deformáció módja

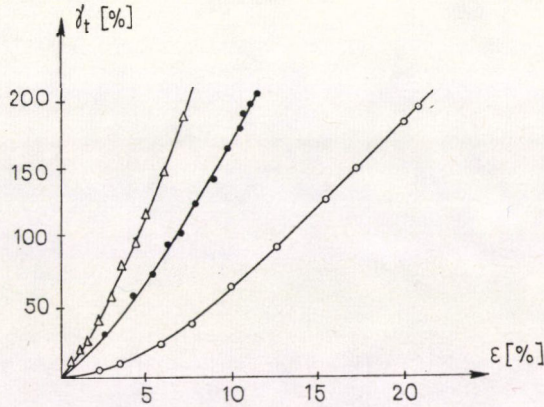


15. ábra. A kezdeti folyásfelület Al (▽) és Cu (×) esetén

Az eredmények jól illeszkednek a Mises-féle folyási felület kontúrájára. Ez egy újabb kísérleti eredmény arra vonatkozóan, hogy a deformációs energiafeltételen alapuló Mises-féle feltétel általában helyesebben írja le a kristályos szerkezetű anyagok viselkedését, mint a Tresca-féle [4]. A folyási felület, amint ez ismeretes, további deformációknál kitágul.

### 9. Néhány kísérleti eredmény tömör minták csavarásánál nagy deformációk esetén

A 7. pontban említett hosszúságváltozás nagy csavarási deformációk esetén igen jelentős (10—20%) is lehet. Természetesen ez elég kicsiny a csavarási deformációhoz képest, de az összes nyírásba bele kell számolni a (8) összefüggés segítségével. Néhány kísérleti eredményt láthatunk a 16. ábrán 550 °C-nál 1 órát hőkezelt Cu-re [4].



16. ábra. A csavarási és nyúlási deformáció összefüggése különböző nyújtófeszültségek mellett Cu esetén

A nyúlási deformáció a csavarás függvényében általában konkáv görbét ad, amelyet a polikristályos szerkezeti felépítéssel magyarázhatunk. Az alakváltozás kezdetén ugyanis az egyes kristallitokban beinduló csúszások nagyobb hányada esik tengelyirányba, mint nagy deformációknál, ahol az inhomogén deformáció következtében érintőlegesen elnyúlt szemcsékben már főleg ebben a kitüntetett irányban történik alakváltozás.

Csavarási vizsgálattal igen jól tanulmányozható az alakítási keményedés nagy deformációk esetén. Ehhez a  $\tau-\gamma$  összefüggés ismerete szükséges. Ezzel a módszerrel polikristályos anyagoknál az alakítási keményedés II., III. és IV. szakasza vizsgálható. A IV. szakaszt éppen a csavarás és nyújtás egyidejű alkalmazásával lehetett kimutatni [4]. Az eredmények szerint ez a szakasz tiszta fémeknél az anyagi minőségtől függetlenül  $\gamma \approx 42\%$  nyírásnál kezdődik.

#### 10. Egyidejű csavarás és nyújtás jellemzése ekvivalens nyújtó feszültséggel és deformációval

Több tengelyű feszültségállapot hatására létrejövő alakváltozást leírhatunk egy feszültségdeformáció görbével az ekvivalens nyújtó feszültség és deformáció fogalmának bevezetésével. Ezek definíciója a következő [11]:

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{3}{2} \sigma'_{ij} \sigma'_{ij}}, \quad (27)$$

$$d\bar{\epsilon} = \sqrt{\frac{2}{3} d\epsilon_{ij} d\epsilon_{ij}}, \quad (28)$$

ahol a kétszeres indexekre összegezni kell és  $\sigma'_{ij}$  a deviátor feszültség tenzor:

$$\sigma'_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \sigma_{\text{II}}. \quad (29)$$

Itt  $\sigma_{\text{II}}$  a diagonális elemek összege és  $\delta_{ij}$  a Kronecker-delta.



Egyidejű csavarás és nyújtás alkalmazásakor a deviátor feszültség tenzor a henger tengelyével összeeső  $z$  tengelyű koordináta-rendszerben [4]:

$$\sigma' = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3}\sigma & \tau & 0 \\ \tau & -\frac{1}{3}\sigma & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{3}\sigma \end{pmatrix}. \quad (30)$$

Hasonlóan a deformációnövekmény tenzor

$$d\tilde{\epsilon} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}d\epsilon & \frac{1}{2}d\gamma & 0 \\ \frac{1}{2}d\gamma & -\frac{1}{2}d\epsilon & 0 \\ 0 & 0 & d\epsilon \end{pmatrix}. \quad (31)$$

(27), (28) és (30), (31)-ből az ekvivalens feszültség, illetve deformációnövekmény

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\sigma^2 + 3\tau^2},$$

$$d\bar{\epsilon} = \sqrt{d\epsilon^2 + \frac{d\gamma^2}{3}}.$$

E mennyiségek segítségével megszerkeszthető az egyidejű csavarást és nyújtást jellemző egyetlen feszültség—deformáció görbe.

#### IRODALOM

1. A. Saveur, Proc. ASTM, 38, 3, 1938.
2. F. A. Mc Clintock and A. S. Argon, Mechanical Behavior of Materials, Addison—Wesley Publishing Company, Inc. Printed in USA, 1966.
3. Kovács István, Magyar Fizikai Folyóirat 15, 125, 1967.
4. Kovács István, Magyar Fizikai Folyóirat 25, 113, 1977.
5. H. G. Grewe und E. Kappler, phys. stat. sol. 6, 339, 1964.
6. A. Nádai: Theory of Flow and Fracture of Solids, Vol. 2. McGraw Hill, 1963. Chapt. 21.
7. Tóth László, Egyetemi doktori értekezés, 1978.
8. J. H. Pointing, Proc. Roy. Soc. 86, 534, 1912.
9. E. A. Davis, J. Appl. Phys. 8, 213, 1937.
10. G. H. Daneshi and J. B. Hawkyard, Int. J. Mech. Sci. 18, 57, 1976.
11. Kaliszki Sándor: Képlékenységtan, Akadémiai Kiadó Budapest, 1975.

# A KÉPLÉKENY ALAKÍTÁS VIZSGÁLATI MÓDSZEREI

## 4. A KÚSZÁS

LENDVAI JÁNOS

ELTE, Általános Fizika Tanszék

### TARTALOM

1. Bevezetés .....	37
2. Anelasztikus (visszaalakuló) kúszás .....	39
3. Alacsony-hőmérsékleti (logaritmikus) kúszás .....	40
4. Magas-hőmérsékleti kúszás.....	43
4.1. Tranziens kúszás .....	44
4.2. Stacionárius kúszás .....	44
4.3. Gyorsuló kúszás .....	45
5. Magas-hőmérsékleti kúszásvizsgálatok .....	46
6. Irodalom .....	49

### 1. Bevezetés

A műszaki gyakorlatban, elsősorban a magas-hőmérsékleti igénybevételre tervezett szerkezetek méretezésekor lényeges a fémek és ötvözetek kúszási jellemzőinek ismerete. A kúszás, vagy más szóval tartósfolyás, tartós igénybevétel hatására végbemenő képlékeny alakváltozás, melynek során tehát a deformáció ( $\varepsilon$ ) a mechanikai feszültségen ( $\sigma$ ) kívül az időtől ( $t$ ) és a hőmérséklettől ( $T$ ) is függ:  $\varepsilon = \varepsilon(\sigma, t, T)$ . Rögzítve a feszültség és a hőmérséklet értékét, a deformáció az idő függvényében változik. A terhelés bekapcsolásának pillanatában a próbatest pillanatszerűen, azonnal deformálódik, ezt követően figyelhető meg a deformáció időfüggő része. A próbatest deformációja tehát így írható le:

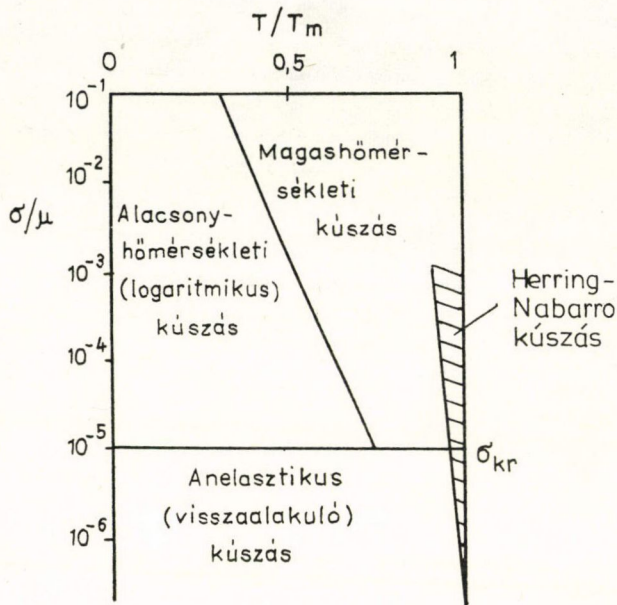
$$\varepsilon = \varepsilon_p + \varepsilon_t, \quad (1)$$

ahol  $\varepsilon_p$  a pillanatszerű,  $\varepsilon_t$  pedig az időfüggő deformációt jelöli. Magas hőmérsékleteken az  $\varepsilon_t$  lényegesen nagyobb lehet, mint  $\varepsilon_p$ , szobahőmérséklet környezetében viszont sokszor (a legtöbb fém és ötvözet nem túl nagy terhelése esetén)  $\varepsilon_t$  hanyagolható el (kivételek: nagytisztaságú alumínium, ólom, ón stb.).

A lejátszódó folyamatok mechanizmusa és ezzel együtt az  $\varepsilon_t$  időfüggése természetesen erősen függ a terheléstől és a hőmérséklettől. A kúszás különböző típusait az ún. kúszási diagram segítségével foglalhatjuk össze (1. ábra), melynek függőleges tengelyén az alkalmazott feszültség, vízszintes tengelyén pedig a hőmérséklet szerepel. Az anyagi minőségtől való függés kiküszöbölésére a feszültséget a nyírási moduluszal ( $\mu$ ), a hőmérsékletet az olvadásponttal ( $T_m$ ) normáltuk. A kritikus csúsztatófeszültségnél ( $\sigma_{kr}$ ) kisebb feszültségek esetén jelentős diszlokációmozgás és sokszorozódás nem lép fel, ennek megfelelően ilyenkor az alakváltozás is kicsi. Nem meglepő tehát, hogy a kúszás különböző típusait elválasztó határ-



vonalak egyike éppen a  $\sigma_{kr}$ -sal esik egybe. Természetesen azon mechanizmusok, melyek  $\sigma < \sigma_{kr}$  esetén kúszást eredményeznek, hozzájárulnak a deformációhoz nagyobb feszültségek alkalmazása esetén is, ezen járulékok azonban legtöbbször jelentéktelenek a jelentős diszlokációmozgásból eredő deformációk mellett.



I. ábra. A kúszási diagram

Alacsony hőmérsékleteken az élkomponenssel is rendelkező diszlokációk csúszósíkjukban viszonylag könnyen mozoghatnak, kúszó mozgásukat azonban megnehezíti, hogy ehhez vakanciák, vagy intersticiális atomok diffúziója szükséges. A diffúzió alacsonyabb hőmérsékleteken lassú, ennek megfelelően ilyenkor a csúszósíkkal párhuzamos irányokon kívüli diszlokációmozgás nehéz. Viszonylag könnyebb a kúszás magasabb hőmérsékleteken és nagyobb feszültségek alkalmazása esetén, így ilyenkor a diszlokációk viszonylag könnyen mozoghatnak minden irányban, ilyen körülmények között tehát a diszlokációmozgásnak egy többlet szabadsági foka van. A fentiek értelmében a  $\sigma_{kr} < \sigma$  esetekben a kúszásnak két típusa létezik: az egyikben (alacsonyabb hőmérsékleteken) a diszlokációmozgásnak egy szabadsági foka van, a másikban (magasabb hőmérsékleteken) kettő.

A következőkben röviden áttekintjük a kúszásjelenségek különböző típusait, majd vázoljuk a kúszásvizsgálatok módszereit és a hosszú idejű mérések lerövidítésére alkalmazható extrapolációs eljárásokat.



## 2. Anelasztikus (visszaalakuló) kúszás

Számos kísérleti megfigyelés szerint a  $\sigma < \sigma_{kr}$  feszültséggel terhelt minta deformációja jól leírható az alábbi időfüggő egyenlettel:

$$\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_0 [1 - \exp(-t/\tau)], \quad (2)$$

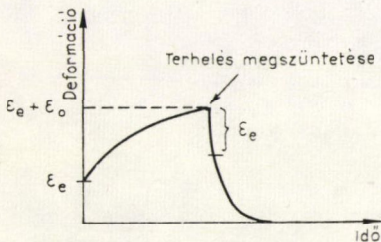
ahol  $\varepsilon_e$  a tisztán rugalmas, pillanatszerű deformáció,  $t$  a megterhelés pillanatától számított idő,  $\varepsilon_0$  és  $\tau$  állandók. A (2) egyenlet második tagja az időfüggő, ún. anelasztikus deformáció. A (2) egyenlet szerint az anelasztikus deformáció nulla közvetlenül a megterhelés után, majd növekvő idővel exponenciálisan nő az  $\varepsilon_0$  határértékhez,  $\tau$  a folyamatra jellemző időállandó. A (2) egyenlettel leírt deformáció—idő összefüggést a 2. ábrán láthatjuk, amelyen feltüntettük a terhelés megszűntetése utáni visszaalakulás folyamatát is. Ha a terhelést megszüntetjük valamely,  $\varepsilon'$  deformáció elérésének megfelelő  $t_0$  időben, akkor ezt követően a deformációt az idő függvényében az

$$\varepsilon = (\varepsilon' - \varepsilon_e) \exp\left(-\frac{t-t_0}{\tau}\right) \quad (3)$$

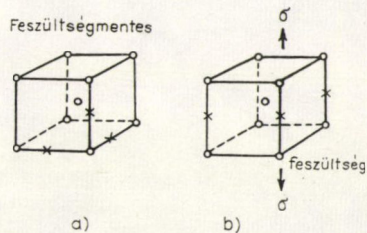
egyenlet írja le. Amint ebből az egyenletből és a 2. ábrából is leolvasható, a deformáció a terhelés megszüntetése után a  $\tau$  időállandóhoz viszonyítva hosszú idő alatt nullára csökken, ezért szokás a kúszás ezen típusát visszaalakulónak is nevezni.

Az anelasztikus kúszás jelensége tanulmányozható a fentiek szerint sztatikus mérésekkel, kényelmesebb azonban a vizsgálatot ciklikusan változó feszültség alkalmazásával elvégezni. Az ilyen méréseknél az egy ciklus alatti csillapítási veszteséget (belső súrlódást) határozzák meg. A (2) és (3) egyenleteknek megfelelően az anelasztikus deformáció egy ciklikusan terhelt mintában általában nincs fázisban az alkalmazott erővel, ezért energia disszipáció lép fel (csillapítási veszteség). Az anelasztikus kúszás tehát felöleli a fémek belső súrlódásának jelenségkörét is (6. fejezet).

Az egyik legtipikusabb mechanizmus az anelasztikus kúszással és a belső súrlódással kapcsolatban a tércentrált köbös vaskristályban elhelyezkedő intersticiális atomok mozgásával kapcsolatos. Az intersticiális atomok (pl. szén, nitrogén) a tck rácsban olyan típusú helyeket foglalhatnak el, mint amilyeneket a 3. ábrán  $x$ -szel jelöltünk meg. Egyensúlyi körülmények között, ha a kristály feszültségmentes, a háromféle intersticiális helyen teljesen egyenletesen oszlanak el az intersticiális atomok.



2. ábra. Az anelasztikus kúszás deformáció—idő görbéje



3. ábra. Intersticiális helyek a tck rácsban feszültségmentes a) és nyújtó feszültséggel terhelt b) állapotban



Ha azonban a kristályt nyújtó feszültség alá helyezzük (3b) ábra), akkor a három intersticiális hely egyike kitüntetetté válik, mivel az alkalmazott feszültség következtében ezen hely két oldalán elhelyezkedő vas atomok távolsága kissé megnő. Ha alacsony hőmérsékleten nagyon nagy feszültséget alkalmaznánk, akkor az intersticiális atomok a 3b) ábrán  $x$ -szel megjelölt helyeken lennének egyensúlyban. Ha azonban a feszültség kicsi, akkor a kedvező és kedvezőtlen helyek közötti  $\Delta E$  energiakülönbség is kicsi, és így nem túl alacsony hőmérsékleteken, amikor a  $kT$  termikus energia nagyobb, mint  $\Delta E$ , a kétféle hely betöltöttsége közötti különbség kicsi.

A kedvező helyek betöltöttsége a feszültség alkalmazása után az intersticiális atomok diffúziójával nő. Az intersticiális atomok diffúziójának időállandója,  $\tau$ , jellemzi tehát a betöltöttség változásának folyamatát. A  $\tau \sim \exp(Q/kT)$  összefüggés írja le a folyamat hőmérsékletfüggését ( $Q$  az intersticiális atomok diffúziós aktiválási energiája).

Közvetlenül a feszültség bekapcsolása után a mintában csak rugalmas deformáció lép fel, az intersticiális helyek betöltöttsége még egyenletes. Minden intersticiális atom megnöveli a szomszédos rácsponti atomok közötti távolságot, így a kedvező helyek betöltöttségének növekedésével a kristály a feszültség irányában megnyúlik, az arra merőleges irányokban viszont összehúzódik, tehát a betöltöttség változásával változik a deformáció, ezt írja le a (2) egyenletben szereplő exponenciális tag.

A fenti modell szerint az anelasztikus deformációra jellemző időállandó hőmérsékletfüggésének is az intersticiális atomok diffúziós aktiválási energiáját kell tartalmaznia, amit a vas-szén rendszer esetén számos kísérlet igazol. A kísérletek tanúsága szerint, továbbá, a (2) egyenletben szereplő  $\varepsilon_0$  telítési deformáció arányos az alkalmazott feszültséggel. A modell ezt is értelmezni tudja: a feszültség növelésével nő a  $\Delta E$ , nő a kedvező és kedvezőtlen helyek betöltöttségének különbsége és ezzel arányosan a fellépő deformáció. Az  $\varepsilon_0$  deformáció természetesen arányos az intersticiális szennyezők koncentrációjával is, így a belső súrlódás nagyságából a szennyezők koncentrációjára következtethetünk. A viszonylag egyszerű — torziós ingával elvégezhető — belső súrlódásméréseket valóban gyakran alkalmazzák kis oldott intersticiális koncentrációk meghatározására vasban, tantáliban stb. A módszer további előnye, hogy a különböző szennyezők megkülönböztethetőek a hozzájuk tartozó időállandók és azok hőmérsékletfüggésében jelentkező  $Q$  diffúziós aktiválási energiák segítségével.

Az intersticiális szennyező atomok viselkedésének példája csak egy a sok mechanizmus közül, amelyek a (2) vagy (3) egyenlettel, vagy ezek bizonyos módosításával leírható anelasztikus kúszást eredményeznek. Az összes lehetséges mechanizmus ismertetése természetesen messze meghaladja a jelen dolgozat célkitűzéseit.

### 3. Alacsony hőmérsékleti (logaritmikusan) kúszás

Alacsony hőmérsékleten a kúszás sok esetben logaritmikusan időfüggéssel írható le. Az 1. ábrán látható diagramról leolvasható, hogy a kúszás ezen típusa a  $\sigma_{kr} < \sigma$  és a  $T < T_m/2$  feltételek együttes teljesülése esetén lép fel. Az alkalmazott feszültség ekkor diszlokációk sokszorozódását és nagy távolságú mozgását eredményezi. A deformáció során fellépő alakítási keményedési mechanizmusok nehezítik a diszlokációmozgást és esetleg leállíthatják a sokszorozódást is. Ha a megterhelés után



közvetlenül minden diszlokációmozgás megszűnne, akkor nem jelentkezne időfüggő deformáció. Egyszerűen belátható azonban, hogy ez nem történhet meg. Mivel az  $\varepsilon - \sigma$  görbe meredeksége nem nulla, a feszültség bármilyen kicsiny növekedése megnöveli a deformációt. A feszültségnövekedés származhat kis, momentán feszültségekből is, melyek a termikus egyensúly miatt szükségszerűen jelentkező feszültségfluktuációk révén minden szilárd testben fellépnek. Annak valószínűsége, hogy egy kiszemelt térfogatelemben egy feszültségfluktuáció megjelenjen, az idővel nő, következésképpen az idő múlásával a külső feszültségekhez hozzáadódó feszültségfluktuációk miatt a deformáció nő. Tehát anélkül, hogy bármilyen feltevést tennénk az alakítási keményedés konkrét mechanizmusára nézve, megállapíthatjuk, hogy a kúszási deformációnak fel kell lépnie a kúszási diagram alacsony-hőmérsékleti tartományában.

Ugyancsak egyszerűen belátható, hogy ez a kúszás *tranzien*s jellegű, azaz sebessége az idő előrehaladásával nullára csökken. A termikus feszültségfluktuációk ui. elősegítik a deformációt, a deformáció növekedése azonban megnöveli az anyag szilárdságát (alakítási keményedés van), tehát minél jobban deformált az anyag, annál nehezebb a további deformáció. Emiatt a folyás sebessége csökken a deformáció növekedésével, tehát az idővel is.

Az alacsony-hőmérsékleti kúszás tranziens jellegét számos kísérlet bizonyítja. A kísérletek alapján a kúszás ezen típusának időfüggését a következő egyenlettel adhatjuk meg:

$$\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_p + \varepsilon_0 \ln(1 + vt), \quad (4)$$

ahol  $\varepsilon_e$  a rugalmas deformáció,  $\varepsilon_p$  a pillanatszerű plasztikus deformáció,  $\varepsilon_0$  és  $v$  állandók. A (4) egyenlet alapján a kúszás sebessége:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\varepsilon_0 v}{1 + vt} \quad (5)$$

tehát a folyási sebesség az idő függvényében valóban csökken. A (4) egyenletben szereplő logaritmikus időfüggés miatt nevezik ezt a típusú kúszást logaritmikusnak is.

Vizsgáljuk meg, hogy milyen folyamatokkal értelmezhetjük a kúszás ezen típusának időfüggését. Osszuk fel a kristályt gondolatban olyan  $L$  élhosszúságú kocka alakú térfogatokra, melyeknek deformációja már függetlennek tekinthető a szomszédos térfogatok deformációitól olyan értelemben, hogy a szomszédos térfogatokban fellépő feszültségek hatására a kiszemelt térfogatban már bekövetkezett deformációk nem alakulnak vissza. Valamely térfogat további deformálásához egy diszlokációnak kell azon keresztülhaladni. Az ehhez szükséges energia:

$$W = U - (\sigma - \sigma^*) b L^2, \quad (6)$$

ahol  $U$  a rövid távú keményítő mechanizmusok leküzdésének energiájátja (pl. diszlokáció erdőn való átjutáshoz szükséges energia),  $\sigma$  a külső feszültség,  $\sigma^*$  pedig az alakítási keményedés hosszú távú járulékaiból származó belső feszültség,  $b$  a Burgers-vektor.

A  $\sigma^*$  belső feszültség első közelítésben így írható:

$$\sigma^* \cong \sigma_0^* + h(\varepsilon - \varepsilon_e - \varepsilon_p), \quad (7)$$



ahol

$$h \approx \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon} \quad (8)$$

jó közelítéssel, feltéve, hogy az alakítási keményedést elsősorban a hosszú távú feszültségterek okozzák.

A kúszás sebessége arányos azon frekvenciával, amellyel a termikus feszültség-fluktuációk deformációt idéznek elő a  $V=L^3$  nagyságú térfogatelemekben. Annak a valószínűsége, hogy egy térfogatelem egységnyi idő alatt deformálódjon:

$$p = \nu' \exp(-W/kT), \quad (9)$$

ahol  $\nu'$  a diszlokációk rezgési frekvenciája. Ez a frekvencia valamivel kisebb, mint az atomok rezgési frekvenciája, értéke kb.  $10^{10} - 10^{11} \cdot s^{-1}$ .

Egy diszlokáció áthaladásakor az  $L^3$  térfogat deformációja közelítőleg  $bL^2$ , így a kúszási sebesség:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{bL^2}{L^3} \nu' \exp(-W/kT). \quad (10)$$

A (6) és (7) összefüggéseket figyelembe véve:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{b}{L} \nu' \exp\left(-\frac{U_0}{kT}\right) \exp\left(\frac{\sigma - h\varepsilon}{kT}\right) bL^2, \quad (11)$$

ahol

$$U_0 = U + bL^2(\sigma_0^* - h\varepsilon_e - h\varepsilon_p). \quad (12)$$

A (11) egyenletet integrálva meghatározhatjuk az  $\varepsilon(t)$  függvényt, amely megfelel a kísérletek alapján megállapított (4) összefüggésnek:

$$\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_p + \varepsilon_0 \ln(1 + \nu t), \quad (13)$$

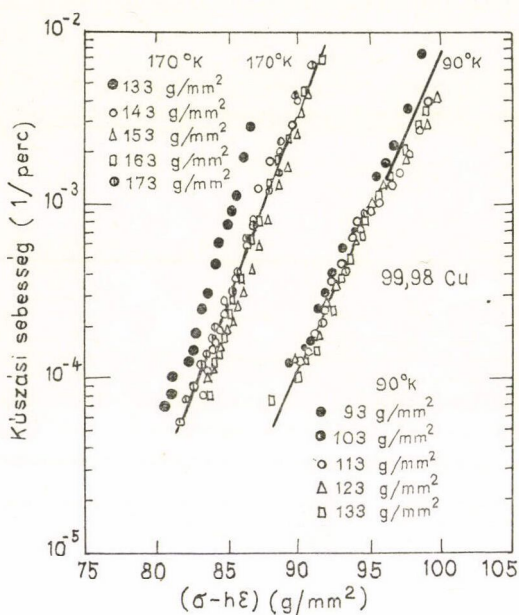
ahol

$$\varepsilon_0 = kT/hbL^2, \quad (14)$$

$$\nu \cong \nu'(hb^2L/kT) \exp(-U/kT). \quad (15)$$

(Feltételeztük, hogy  $\sigma \cong \sigma_0^*$ .)

A 4. ábrán réz egykristályokon, az alakítási keményedés I. szakaszában végzett alacsony-hőmérsékleti kúszásvizsgálatok eredményeit láthatjuk [1]. Az ábrán a kúszási sebesség logaritmusa a  $\sigma - h\varepsilon$  mennyiség függvényében tüntették fel. Az adatokat két különböző hőmérsékleten 5–5 különböző feszültséggel végzett mérésekből kapták. A mérési pontok egy adott hőmérséklet esetén egy egyenesre esnek, ami azt jelenti, hogy a (11) egyenletben szereplő  $U_0$  független a külső feszül-



4. ábra. A kúszási sebesség logaritmusa a  $\sigma - h\varepsilon$  mennyiség függvényében réz egykristályokon [1]



ségtől. Hasonló eredményre jutottak *hcp* fémek esetén a könnyű csúszás tartományában, valamint *fcc* fémeknél az alakítási keményedés II. szakaszában is.

A méréseknek gyakran célja a  $W$  aktiválási energia meghatározása. Ez a (10) egyenlet alapján úgy történhet, hogy hirtelen megváltoztatjuk a mérés hőmérsékletét 5–10°-kal és közvetlenül a hőmérséklet változtatása előtt és után meghatározzuk a kúszási sebesség értékét, ezekből:

$$W = \frac{kT_1T_2}{T_1 - T_2} \ln(\dot{\epsilon}_1/\dot{\epsilon}_2). \quad (16)$$

#### 4. Magas-hőmérsékleti kúszás

A kúszásnak gyakorlati szempontból ez a leglényegesebb típusa. Jellegzetes magas-hőmérsékleti kúszásgörbét láthatunk az 5. ábrán. A folyamat, amint az ábrán is látható, három szakaszra bontható aszerint, hogy

$$\frac{d^2\epsilon}{dt^2} \cong 0.$$

A kúszás ezen típusát először Andrade vizsgálta részletesen [2], ezért ezt a fajta kúszást Andrade-kúszásnak is szokták nevezni. Megállapította, hogy a kúszási diagram ezen tartományában állandó feszültség és állandó hőmérséklet esetén a deformáció időfüggését a következő egyenlet írja le:

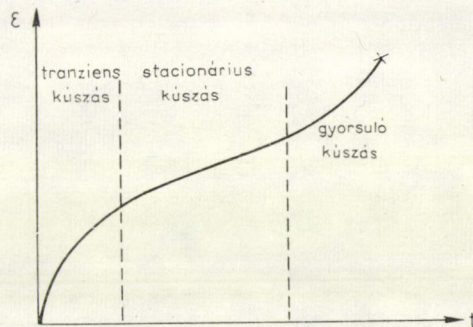
$$\epsilon = \epsilon_e + \epsilon_p + \beta t^n + Kt, \quad (17)$$

ahol  $\epsilon_e$  és  $\epsilon_p$  jelentése ugyanaz, mint a (4) összefüggésben,  $n$ ,  $\beta$  és  $K$  állandók. A (17) Andrade-egyenlet természetesen nem tartalmazza a gyorsuló szakaszt, amelyet jól alakítható fémek esetén általában a minta befűződése, ridegebb anyagok esetén pedig üregek keletkezése okoz. *Andrade* vizsgálatai szerint az  $n$  értéke a (17) egyenletben 1/3. Később mások  $n$  különböző értékeit állapították meg 1/4 és 2/3 között, maga *Andrade* azonban még 52 évvel később is az 1/3 értéket bizonyította [3]. A lényeges az, hogy  $n < 1$  és így a (17) egyenletet idő szerint differenciálva a következő kifejezést kapjuk:

$$\dot{\epsilon} = \frac{n\beta}{t^{1-n}} + K, \quad (18)$$

melynek első tagja időben nullához tart, a kúszási sebesség tehát a  $K$  állandó értékre csökken folyamatosan.

A kúszási diagram ezen tartományában a kúszási deformáció igen nagy lehet, 100–300% deformáció is elérhető a minta törése előtt olyan feszültségek alkalmazá-



5. ábra. Jellegzetes magas-hőmérsékleti kúszásgörbe



sával, melyek csak néhány százalékos pillanatszerű deformációt hoznak létre. Ezek jóval nagyobb deformációk, mint amilyenek az anelasztikus, vagy az alacsony-hőmérsékleti kúszásnál fellépnek, ahol 1% már nagy deformációnak számít. Az, hogy a deformáció a magas-hőmérsékleti kúszásnál ilyen nagy lehet, azt jelenti, hogy ez a folyamat nem lehet termikus feszültségfluktuációk diszlokációkra gyakorolt hatásának következménye.

#### 4.1. *Tranziens kúszás*

A magas-hőmérsékleti kúszás tranziens szakaszában fellépő deformáció relatív nagysága a hőmérséklettől és a feszültségtől függ, minél alacsonyabb a hőmérséklet és minél nagyobb az alkalmazott feszültség, annál nagyobb lesz a tranziens szakaszban létrejött deformáció aránya.

A kúszási diagram alacsony- és magas-hőmérsékleti tartományait elválasztó határvonal természetesen nem nagyon éles, a hőmérséklet csökkentésével a magas-hőmérsékleti kúszás stacionárius komponense csökken, továbbcsökkentve a hőmérsékletet a  $\beta t^n$  tag helyett fokozatosan a  $\ln(1 + vt)$  kifejezés jön be [4].

#### 4.2. *Stacionárius kúszás*

A magas-hőmérsékleti kúszás stacionárius szakaszának feszültségtől és hőmérséklettől való függését vizsgálják mai napig is a legkiterjedtebben, egységes elméletről, vagy legalább olyanról, amelyik az anyagok egy csoportjára nézve egyértelműen megadná a magas-hőmérsékleti stacionárius kúszás mechanizmusát, még nem beszélhetünk. A közelítő fizikai kép, amelynek segítségével a stacionárius kúszás jelenségét értelmezhetjük az, hogy az alakítási keményedés deformációsebességet csökkentő hatását a magas hőmérséklet következtében fellépő megújulási, vagy rekristallizációs folyamat kiegyenlíti és így alakul ki az állandó deformációsebesség.

A stacionárius kúszás sebességét a (17) és (18) egyenletben szereplő  $K$  mennyiség adja meg, melynek hőmérséklet és feszültségfüggését a következőképpen írhatjuk fel a kísérleti tapasztalatok alapján:

$$K = K_0(\sigma) \exp(-Q/kT), \quad (19)$$

tehát a hőmérsékletfüggést, illetve a feszültségfüggést tartalmazó tényező szeparálható, mivel a tapasztalatok szerint a  $Q$  aktiválási energia nem függ a feszültségtől, legalábbis amíg a feszültség nem túl nagy ( $\sigma/\mu < 10^{-3}$ ), és nem függ a deformációtól sem. Tiszta fémek esetén  $Q$  értéke általában megegyezik, vagy közel esik az öndiffúzió aktiválási energiájához.

A  $K_0(\sigma)$  függvényre igen sokféle egyenlet ismeretes, melyek közül mi itt csak a leggyakrabban használatosakat említjük meg, a különböző egyenletek az összefoglaló jellegű művekben általában megtalálhatók, pl. [5–8].

Gittus modellje szerint [9]  $K_0(\sigma) \sim (\sigma/\mu)^3 C_j$ , ahol  $\mu$  a nyírási modulusz,  $C_j$  pedig a térfogategységben található diszlokáció lépcsők száma. Hasonló hatványfüggvényt, különböző kitevőkkel sokan megállapítottak, pl. [10–13], a hatványkitevő értéke tiszta fémek esetén általában 3 és 4,5 közé esik, bár 5,5-es értéket is találtak már.

A  $K_0(\sigma)$  másik, sokak által használt formája a sinus hyperbolicus függvényt tartalmazza [12]:

$$K_0 = C \operatorname{sh}(\alpha\sigma/kT), \quad (20)$$



ahol  $C$  és  $\alpha$  állandók, vagy [15]:

$$K_0 = C' \sigma^2 \operatorname{sh}(\beta \sigma^{2.5}/kT), \quad (21)$$

ahol  $C'$  és  $\beta$  állandók. Alacsony feszültségek esetén a (20) egyenlet szerint  $K_0 \sim \sigma$ , a (21) szerint  $K_0 \sim \sigma^{4.5}$ , ezek tehát ebben a határesetben visszaadják a hatványfüggvény megoldásokat.

### 4.3. Gyorsuló kúszás

A magas-hőmérsékleti kúszás ezen szakasza nem minden esetben jelenik meg, például gyorsuló kúszás nem lép fel a csavarással végzett kúszásvizsgálatoknál. A húzó igénybevétellel végzett kúszásvizsgálatoknál azonban, ahol a gyorsuló szakasz jelentkezhet, megjelenése befolyásolhatja a másik két szakaszt is a kúszásnak. Előfordulhat például, hogy a gyorsuló szakasz elkezdődik még mielőtt a transziens kúszás befejeződne és így stacionárius kúszás ki sem alakul [15, 16].

A deformációsebesség növekedésének oka, mint már a bevezetésben említettük, inhomogenitások keletkezése és növekedése. Ilyen inhomogenitásokat jelentenek például a minta belsejében kialakuló üregek, szemcsehatár menti törés és a minta keresztmetszetében kialakuló makroszkopikus inhomogenitások (befűződések). Ez utóbbiak hatását vizsgálta újabban *Burke* és *Nix* [17]. Megfontolásaikban a *Hart-féle* [18] stabilitási kritériumból indulnak ki [19], mely szerint nyújtási deformáció esetén a stabil folyás feltétele:

$$\gamma + m \geq 1, \quad (22)$$

ahol

$$\gamma \equiv \left. \frac{\partial \ln \sigma}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon} \quad (23)$$

és

$$m = \left. \frac{\partial \ln \sigma}{\partial \ln \dot{\varepsilon}} \right|_{\varepsilon}. \quad (24)$$

A stabil folyás feltétele megállapítható mind az állandó terhelés, mind az állandó feszültség mellett végzett kúszásvizsgálatokra.

Az állandó terheléssel végzett kúszásvizsgálatok stabilitási kritériumának meghatározásához használjuk fel a következő összefüggést [19]:

$$\frac{\dot{\sigma}}{\sigma} = \gamma \dot{\varepsilon} + m \frac{\ddot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}}. \quad (25)$$

Állandó terhelés esetén ( $\dot{P}=0$ )

$$\frac{\dot{\sigma}}{\sigma} = \frac{\dot{l}}{l} = \dot{\varepsilon}. \quad (26)$$

A (25) és (26) egyenletekből

$$\gamma \dot{\varepsilon}^2 + m \ddot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}^2. \quad (27)$$

Ebből az összefüggésből  $\gamma$ -t vagy  $m$ -et kifejezve és azt a (22) Hart-feltételbe helyettesítve kapjuk az állandó húzó terheléssel végzett kúszásvizsgálatok stabilitási feltételét:

$$[(\dot{\varepsilon})^2 - \ddot{\varepsilon}]_P \geq 0. \quad (28)$$



Az állandó feszültséggel végzett kúszásvizsgálatoknál a terhelést folytonosan változtatni kell úgy, hogy a

$$\delta\sigma = \sigma\gamma\delta\varepsilon + \frac{\sigma}{\dot{\varepsilon}} m\delta\dot{\varepsilon} = 0 \quad (29)$$

összefüggés fennálljon. A (29) egyenletből egyszerűen adódik:

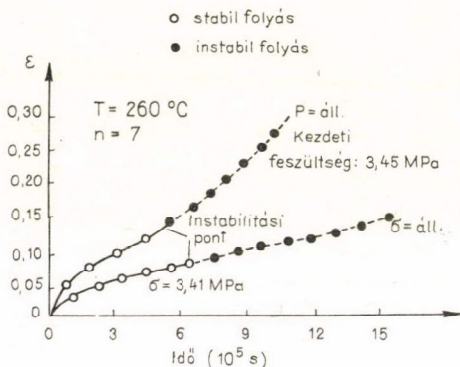
$$\gamma = -m \left( \frac{\partial \ln \dot{\varepsilon}}{\partial \varepsilon} \right)_\sigma, \quad (30)$$

amit a (22) Hart-feltételbe helyettesítve kapjuk a stabilitás feltételét *állandó húzófeszültséggel* végzett kúszásvizsgálatok esetére:

$$\left( \frac{\partial \ln \dot{\varepsilon}}{\partial \varepsilon} \right)_\sigma \leq 1 - n', \quad (31)$$

ahol  $n' = \frac{1}{m}$ . Mivel  $n'$  értéke fémek esetén mindig nagyobb, mint 2,  $\left( \frac{\partial \ln \dot{\varepsilon}}{\partial \varepsilon} \right)_\sigma$ -nak negatívnak kell lennie a stabil tartományban.

Burke és Nix a (28) és (31) stabilitási feltételek tükrében megvizsgálták nagy tisztaságú, durva szemcsés alumínium állandó terhelés, ill. állandó feszültség mellett kapott kúszási görbéit (6. ábra). Tiszta alumínium ( $n' \approx 7$ ) esetén tehát az állandó feszültséggel végzett kúszásvizsgálat teljes stacionárius szakasza már instabillá adódik.



6. ábra. Durva szemcsés alumínium állandó terhelés, illetve állandó feszültség mellett mért kúszási görbéinek stabil és instabil szakaszai [17]

Burke és Nix szerint gyakran megfigyelhető a stacionárius kúszás olyankor, amikor a stabilitás feltétele már nem teljesül, amit ők úgy magyaráznak, hogy az inhomogén deformáció ilyenkor lassan növekszik. Numerikus módszerekkel megvizsgálták továbbá a befűződések hatását a deformációs folyamatra, és megállapították, hogy normál feszültségkivevők esetén ( $\dot{\varepsilon} = B\sigma^n$ ;  $n \sim 5-10$ ) az inhomogén deformáció nem okoz lényeges eltérést a stacionárius kúszás deformációsebességében a homogén esethez képest. Megállapításaik szerint stabilitás szempontjából az állandó terheléssel végzett vizsgálatok nem rosszabbak, mint az állandó feszültséggel végzettek.

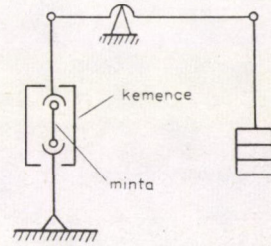
## 5. Magas-hőmérsékleti kúszásvizsgálatok

A magas-hőmérsékleti kúszásvizsgálatoknál a próbatestet meghatározott, állandó hőmérsékletre hevítik és állandó erővel vagy állandó feszültséggel terhelik. Az állandó erővel történő terhelés megvalósítása gyakorlatilag sokkal egyszerűbb, így ez a vizsgálati eljárás az elterjedtebb, a jelenségek elméleti tanulmányozásának szempontjából azonban az állandó feszültséggel végzett vizsgálatok az előnyösebbek.



Állandó terheléssel működő kúszásvizsgáló berendezés elvi vázlata látható a 7. ábrán. A berendezésnek alkalmasnak kell lennie arra, hogy a próbatesteket lökésmentesen lehessen megterhelni, továbbá arra, hogy a próbatest hőmérsékletét a vizsgálat alatt megfelelően stabilizálni lehessen ( $600^\circ\text{C}$  alatt  $\pm 3^\circ\text{C}$ ,  $600$  és  $800^\circ\text{C}$  között  $\pm 4^\circ\text{C}$ ,  $800$  és  $1000^\circ\text{C}$  között  $\pm 6^\circ\text{C}$  az előírt stabilitás). A megnyúlást a próbatesten rögzített jelek relatív elmozdulásának mérésével szokták meghatározni, pl. extenzométerrel, vagy az elmozdulás optikai nagyításával.

Az állandó feszültséggel végrehajtott vizsgálatoknál a fenti követelményeken kívül az állandó feszültség biztosítására a terhelést a keresztmetszet-változásnak megfelelő ütemben folyamatosan változtatni kell. Andrade ezt úgy oldotta meg, hogy alkalmas alakú súlyok adott sűrűségű folyadékba merültek a minta alakváltozása által megszabott mélységig. Huzalminták esetén alkalmazták azt az eljárást, hogy  $V$  alakúra hajlított próbatesteket a  $V$  csúcsában függő súllyal terhelnek meg. A huzal nyújtásával a  $V$  két szára közötti szög és ennek megfelelően a huzalt feszítő erő is változik (csökken). További lehetőség pl. az, hogy a 7. ábrán láthatóhoz hasonló berendezésnél a súlyok erőkarja csökken a minta megnyúlása által megszabott módon.



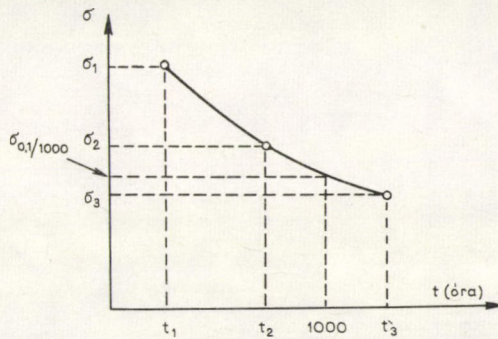
7. ábra. Állandó terheléssel működő kúszásvizsgáló berendezés elvi vázlata

A továbbiakban röviden megvizsgáljuk a gyakorlati szempontból legfontosabb állandó húzóterheléssel végzett kúszásvizsgálatokból meghatározható leglényegesebb jellemzőket és azok kiértékelésének módját. A következőkben tehát mindig feltesszük, hogy  $P = \text{áll.}$  és a feszültségek mindig a  $P/q_0$  hányadost jelentik, ahol  $q_0$  a minta eredeti (deformáció előtti) keresztmetszete.

A kúszáshatár az az állandó feszültség, amely bizonyos hőmérsékleten előírt idő alatt meghatározott mértékű megnyúlást okoz. Pl. a  $\sigma_{0,1/1000}$  az a feszültség, amely a vizsgálat hőmérsékletén 1000 óra alatt 0,1% kúszási deformációt (megnyúlást) hoz létre.

Az időszilárdság az a legnagyobb feszültség, amely bizonyos hőmérsékleten előírt időn belül még nem vezet törésre. Pl.  $\sigma_{B/10\,000}$  az a legnagyobb feszültség, amely a vizsgálat hőmérsékletén 10 000 óra alatt még nem okozza a minta törését.

A kúszáshatár, illetve időszilárdság meghatározásánál problémát jelent az, hogy nem tudunk olyan feszültséget alkalmazni, amely a vizsgálat hőmérsékletén éppen az előírt idő alatt hozná létre az előírt mértékű megnyúlást, ill. idézné elő a minta szakadását. Pl. a  $\sigma_{0,1/1000}$  meghatározásához ezért legalább három különböző feszültséggel kell elvégezni a mérést és minden mérésből megállapítani azt az

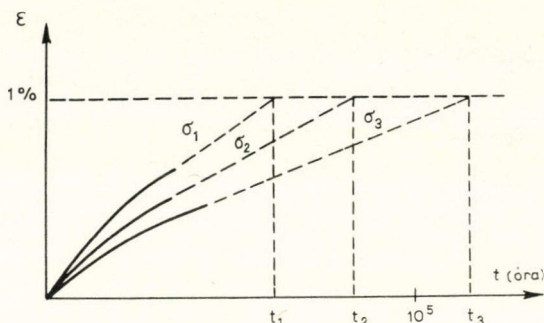


8. ábra. A  $\sigma_{0,1/1000}$  meghatározása három különböző feszültséggel végzett mérés alapján



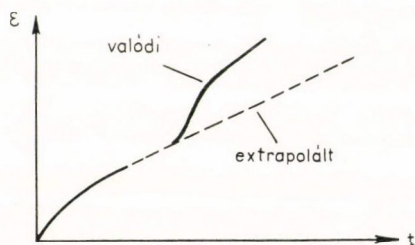
időt, amely az 0,1% kúszás eléréséhez szükséges. Az így kapott  $\sigma - t$  összefüggést ábrázolva (8. ábra) meghatározhatjuk  $\sigma_{0,1/1000}$  értékét. Hasonló módon járhatunk el az időszilárdság meghatározásánál is. Nagyon lényeges, hogy a meghatározandó pont a mérési pontok közé essen az ábrán, ellenkező esetben az eredmény hibája igen nagy lehet.

Látható, hogy a kúszás jellemzőinek meghatározásához nagyszámú, hosszú időtartamú vizsgálatra van szükség. Ezért fontosak az olyan extrapolációs eljárások, melyek lehetővé teszik a kúszási paraméterek rövidített vizsgálatok alapján történő meghatározását. A rövidített időtartamú vizsgálatokat elsősorban akkor alkalmazzák a mérnöki gyakorlatban, ha az üzemidő meghaladja a 10 000 órát.



9. ábra. A  $\sigma_{1/100000}$  meghatározása három különböző feszültséggel végzett mérés extrapolációjával

Az egyik gyakran alkalmazott eljárásnál a kúszás stacionárius szakaszából extrapolálunk. Legyen pl. a  $\sigma_{1/100000}$  meghatározása a cél. Ismét legalább három különböző  $\sigma$  mellett végzünk méréseket, az extrapolációt a 9. ábrán vázolt módszerrel végezzük el. (Az ábrán a folytonos görbék jelzik a ténylegesen mért, a szaggatott vonalak pedig az extrapolált szakaszokat.) Ennél az eljárásnál nyilvánvaló követelmény, hogy a méréseket minden feszültséggel annyi ideig végezzük, hogy a stacionárius kúszás szakaszát elérjük. Ilyen körülmények között is fennáll azonban annak a veszélye, hogy üzemi körülmények között a hosszú hőtartás vagy esetleg a deformáció következtében olyan szerkezeti átalakulás megy végbe, amely a kúszás sebességét megnöveli (10. ábra) és így módon az anyag a vártnál lényegesen rövidebb idő alatt megy tönkre. Az extrapolációnak ez a módja tehát csak olyan anyagokra és olyan üzemi hőmérsékletekre biztonságos, amelyekre van mérés a tényleges üzemidőre is.



10. ábra. A stacionárius kúszás közben fellépő szerkezeti átalakulás, amelynek következtében a kúszási sebesség megnő

A vizsgálatok lerövidítésének másik módja az emelt hőmérsékleteken történő mérés, ha ugyanis az üzemi hőmérsékletnél magasabb hőmérsékleten végezzük el a mérést, akkor — ugyanazon feszültség mellett — adott deformáció eléréséhez lényegesen rövidebb időre van szükség. Az ered-



mények kiértékeléséhez természetesen ismernünk kell az idő és hőmérséklet közötti kapcsolatot. Az ilyen jellegű vizsgálatoknál leggyakrabban a Larson—Miller eljárás alkalmazzák [20, 21], mely szerint

$$T(C + \lg t) = \text{áll.}, \quad (32)$$

ahol  $C$  az anyagi minőségtől függő állandó, értéke pl. acélokra 20.

Az emelt hőmérsékletű vizsgálatoknál természetesen csak olyan mértékű hőmérsékletnövelés megengedett, melyről biztosan tudjuk, hogy az anyag szerkezetét és a deformációs folyamat mechanizmusát nem változtatja meg, ezért a gyakorlatban 50 °C-nál nagyobb hőmérsékletnövelést nem alkalmaznak. Ilyen mértékű hőmérsékletnöveléssel is már igen nagy mértékben rövidül a vizsgálati idő, pl. 600 °C-os üzemi hőmérsékletre 10<sup>5</sup> órára tervezett acél esetén 650 °C-on végezve a mérést (32) szerint csak kb. 4500 órás vizsgálatra lenne szükség. Megjegyezzük azonban, hogy a mérési idő túlzott lerövidítése igen nagy mértékben rontja az extrapoláció biztonságát, ezért általában nem alkalmaznak tízszeresnél nagyobb arányú rövidítést.

#### IRODALOM

1. H. Conrad, *Acta Met.* 6, 339, 1958.
2. E. N. da C. Andrade, *Proc. Roy. Soc. A84*, 1, 1910.
3. E. N. da C. Andrade, *Phil. Mag.* 7, 2003, 1962.
4. O. H. Wyatt, *Proc. Phys. Soc. London*, B66, 495, 1953.
5. A. J. Kennedy: *Processes of Creep and Fatigue in Metals*, John Wiley and Sons, New York, 1963.
6. F. Garofalo: *Fundamentals of Creep and Creep Rupture in Metals*, MacMillan, New York, 1965.
7. J. Weertman and J. R. Weertman: *Mechanical Properties, Strongly Temperature Dependent, Physical Metallurgy* (Editor: R. W. Cahn), North Holland, Amsterdam, 1971.
8. J. H. Gittus: *Creep, Viscoelasticity and Creep Fracture in Solids*, Applied Science, London, 1975.
9. J. H. Gittus, *Acta Met.* 22, 789, 1974.
10. J. E. Dorn, *J. Mech. Phys. Solids*, 3, 85, 1954.
11. F. Garofalo, *Trans. Met. Soc. AIME*, 227, 351, 1963.
12. J. Weertman, *Trans. Met. Soc. AIME*, 218, 207, 1960.
13. M. F. Ashby, *Acta Met.* 20, 887, 1972.
14. P. Feltham, *Proc. Phys. Soc. London*, B66, 865, 1953.
15. W. R. Johnson, C. R. Barnett and W. D. Nix, *Met. Trans.* 3, 695, 1972.
16. A. T. Robinson, T. E. Tietz and J. E. Dorn, *Trans. Am. Soc. Metals*, 44, 896, 1972.
17. M. A. Burke and W. D. Nix, *Acta Met.* 23, 793, 1975.
18. E. W. Hart, *Acta Met.* 15, 351, 1967.
19. Kovács I., Jelen cikksorozat, 1. fejezet.
20. F. R. Larson and J. Miller, *Trans. Amer. Soc. Mechan. Engrs.* 74, 765, 1953.
21. H. Schmiedel: *Statische Festigkeitsprüfung, Werkstoffprüfung von Metallen* (Ed. K. Nitzsche) VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1968, p. 95.





# A KÉPLÉKENY ALAKÍTÁS VIZSGÁLATI MÓDSZEREI

## 5. A FESZÜLTSGRELAXÁCIÓ

TASNÁDI PÉTER

ELTE, Általános Fizika Tanszék

### TARTALOM

1. Bevezetés .....	51
2. A relaxációs kísérlet és értékelése .....	52
2.1. A kísérleti berendezés szerepe .....	52
2.2. A kísérleti eredmények kiértékelése .....	55
3. A mérések elméleti értékelése .....	61
3.1. Anelasztikus relaxáció .....	62
3.2. A képlékeny relaxáció .....	63
3.2.1. Diszlokációs modellek .....	63
3.2.2. Fenomenologikus, ill. „félmikro” modellek .....	67
3.2.3. A modellek közötti kapcsolat .....	69
4. Összetett vizsgálati módszerek .....	70
5. Irodalom .....	73

### 1. Bevezetés

A tapasztalat azt mutatja, hogy ha egy anyagot deformálunk, majd a deformációt állandó értéken tartjuk, akkor a deformáció fenntartásához szükséges feszültség csökken, majd beáll egy, a kezdetinél kisebb állandó értékre. Ez a jelenség a feszültségrelaxáció, vagy ernyedés. (Természetesen a feszültségrelaxáció egyes anyagok esetén szinte észlelhetetlenül kicsinnyé is válhat.)

A feszültségrelaxáció gyakorlati szempontból rendkívül fontos, mert a szerkezeti anyagok előállításakor feltétlenül ismerni kell a használat során bekövetkező ernyedés időbeli lefolyását. A jelenség azonban elméleti szempontból is érdekes, mert a viszonylag egyszerű relaxációs vizsgálat alapján az anyag mikroszerkezetére következtethetünk.

A kísérleti vizsgálat során többnyire egytengelyű nyújtás (1. fejezet) után bekövetkező  $\sigma(t)$  ernyedési görbét veszünk fel, ezért a továbbiakban csak ezzel az esettel foglalkozunk.

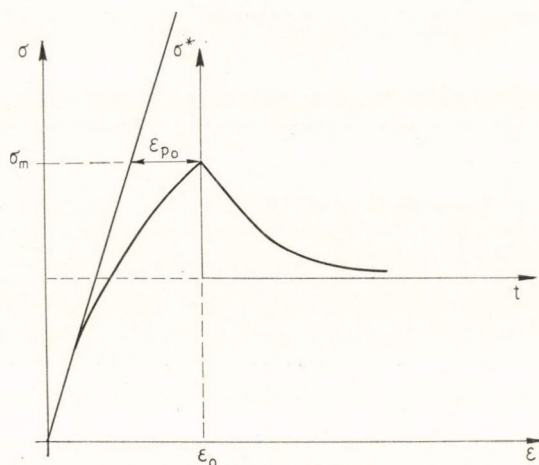
Az 1. ábra egy tipikus relaxációs görbét mutat. A grafikon első része a minta megnyújtását leíró  $\sigma = \sigma(\varepsilon)$  görbét mutatja, míg az  $\varepsilon_0$  relatív megnyúlás elérése után az  $\varepsilon_0 = \text{állandó}$  érték mellett bekövetkező  $\sigma^* = \sigma^*(t)$  feszültség—idő görbét rajzoltuk be. Az utóbbi esetben a

$$\sigma^* = \sigma - \sigma_i \quad (1)$$

effektív feszültség a relaxáció lezajlása után beálló feszültségtől vett eltérést jelenti. A  $\sigma(t)$  relaxációs görbe értékeléséhez azt kell figyelembe vennünk, hogy a minta  $\varepsilon$  megnyúlása az  $\varepsilon_r$  rugalmas és  $\varepsilon_n$  nem rugalmas részből tevődik össze, tehát

$$\varepsilon = \varepsilon_r + \varepsilon_n. \quad (2)$$





1. ábra. Tipikus feszültségrelaxáció görbe

Az  $\varepsilon = \varepsilon_0$  állandó megnyúlás fenntartása mellett azért következik be feszültségcsökkenés, mert az  $\varepsilon_r$  rugalmas megnyúlás egy része nem rugalmas (képlékeny vagy anelasztikus) deformációvá alakul át, s így a rugalmas feszültség a

$$\sigma = E\varepsilon \quad (3)$$

formulának megfelelően csökken ( $E$  a Young-modulusz). Világosabbá válik az összefüggés, ha az (1) és (2) formulákat deriváljuk, és  $\dot{\varepsilon}_r$ -t kiküszöböljük. Ekkor az

$$\dot{\varepsilon}_n = -\frac{\dot{\sigma}}{E} \quad (4)$$

összefüggéshez jutunk. (4)-ből látható, hogy a  $\sigma(t)$  feszültségrelaxációs görbe felvételéből a minta deformációjának nem rugalmas részére következtethetünk.

A következőkben először a kísérleti eredmények értékelésének problémáival és az értékelés módszereivel foglalkozunk, majd röviden áttekintjük a kísérleti eredmények elméleti értelmezésének lehetőségeit.

## 2. A relaxációs kísérlet és értékelése

### 2.1. A kísérleti berendezés szerepe

A feszültségrelaxációs kísérlet során a mintát valamilyen berendezés segítségével adott keresztfej sebesség mellett megnyújtjuk. Az eredmények értékelésekor figyelembe kell vennünk, hogy

1. a kísérlet során a berendezés is megnyúlik,
2. a berendezés általában nem a  $\sigma = \sigma(t)$  feszültség—idő, hanem a  $P = P(t)$  terhelés—idő függvényt regisztrálja,
3. ha a keresztfej sebesség nagy, magában a berendezésben is relaxációs folyamat zajlik le.

Ha a berendezés deformálódását is figyelembe akarjuk venni, akkor a (2) formula helyett az

$$\varepsilon = \varepsilon_r + \varepsilon_p + \varepsilon_b \quad (5)$$

összefüggést kell használni, ahol  $\varepsilon_b$  a berendezés relatív megnyúlása. Az  $\varepsilon_b$  relatív megnyúlást itt a minta plasztikus hosszára vonatkozóan kell meghatározni, tehát

$$\varepsilon_b = \frac{\Delta l_b}{l}, \text{ ahol } \Delta l_b \text{ a berendezés megnyúlása, } l \text{ pedig a minta hossza.}$$

A  $P(t)$  terhelés—idő görbe értelmezésére, s ebből  $\sigma(t)$  meghatározására Hart modelljét használjuk [1]. A modell a berendezés alakváltozását is figyelembe veszi. Hart elképzelése szerint a feszültségrelaxációs kísérlet szempontjából a minta és a berendezés együttesét egy plasztikusan viselkedő testtel sorba kötött  $K_e$  effektív direkción állandójú rugóval helyettesíthetjük.  $K_e$ -t azért nevezzük effektív direkción állandónak, mert a berendezés és a minta együttes rugalmas tulajdonságait jellemzi.

A modell szerint a rugó a minta és a mérőberendezés kombinált rugalmas tulajdonságait reprezentálja. Jelöljük a pillanatnyi terhelést  $P$ -vel, a minta plasztikus hosszát (amely a tényleges hosszánál kevesebb) pedig  $l$ -lel, valamint legyen  $l_1$  a  $C$  keresztfej és egy fix  $O$  pont távolsága (2. ábra). Az egyszerűség kedvéért érdemes az  $O$  pontot úgy választani, hogy  $P=0$  esetén  $l_1=l$  legyen. Ekkor ugyanis

$$P = K_e(l_1 - l) \quad (6)$$

(6)-ból kifejezhető a minta képlékeny deformációjának sebessége:

$$\dot{l} = l_1 - \frac{\dot{P}}{K_e} \quad (7)$$

s minthogy  $l_1(t)$  és  $P(t)$  mérhető, a vizsgálatból meghatározható a  $\sigma$ ,  $\dot{\varepsilon}$  és  $\varepsilon$  időfüggése is. Minthogy a vizsgálat során a minta térfogata állandónak tekinthető, fennáll az

$$\frac{l}{l_0} = \frac{q_0}{q} \quad (8)$$

összefüggés, ahol  $l$  és  $q$  a pillanatnyi,  $l_0$  és  $q_0$  pedig a kezdeti hossz, illetve keresztmetszet. Így

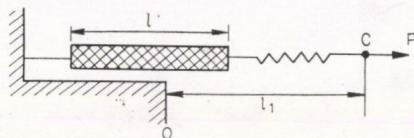
$$\sigma = \frac{P}{q} = \frac{Pl}{q_0 l_0} \quad (9)$$

és

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\dot{l}}{l}, \quad (10)$$

valamint

$$\varepsilon = \ln \frac{l}{l_0}. \quad (11)$$



2. ábra. Hart modellje



A fentiekben elmondottak tetszőleges nyújtási vizsgálatra érvényesek, s ahhoz, hogy a feszültségrelaxációs vizsgálatra korlátozódjunk, az  $l_1=0$  helyettesítést kell elvégezni.

Szükséges még a  $K_e$  direkciós állandó meghatározása a minta és a berendezés  $K_1$  és  $K_2$  direkciós állandói segítségével. Minthogy a berendezés és a minta rugalmas szempontból sorba kötött rugóknak tekinthetők:

$$K_e = \frac{K_1 K_2}{K_1 + K_2}. \quad (12)$$

A direkciós állandó és a Young-modulusz között fennálló

$$E = \frac{Kl}{q} \quad (13)$$

összefüggés alapján az effektív direkciós állandó a minta  $E$  Young modulusza segítségével a

$$K_e = \frac{E}{\frac{E}{K_2} + \frac{l}{q}} \quad (14)$$

alakban írható fel. A (8) formula figyelembevételével (14) a

$$K_e = \frac{E}{\frac{E}{K_2} + \frac{l_0(1+\varepsilon)^2}{q_0}} \quad (15)$$

alakra hozható.

A minta és a berendezés együttes rugalmas tulajdonságainak leírására a (13) formula alapján szokás bevezetni az  $E_e$  effektív Young-moduluszt is. Ennek megfelelően

$$E_e = \frac{l}{q} K_e = \frac{E}{\frac{l_0}{q_0} \frac{E}{K_2} + (1+\varepsilon)^2}. \quad (16)$$

Az így értelmezett effektív Young-modulusz segítségével a berendezés megnyúlását is figyelembe véve az  $\dot{\varepsilon}_n$  megnyúlási sebességet a (4)-hez hasonló alakú

$$\dot{\varepsilon}_n = -\frac{\dot{\sigma}}{E_e} \quad (17)$$

összefüggéssel fejezhetjük ki.

A relaxációs kísérletben az  $\varepsilon$  megnyúlás általában kicsi, ezért  $K_e$  és  $E_e$  értéke állandónak tekinthető. A különböző szerzők általában különböző közelítéseket alkalmaznak. Pl. Guin és Pratt [2] a  $q_0$  és  $l_0$ -hoz tartozó ( $\varepsilon=0$ )

$$K_e^{(0)} = \frac{E}{\frac{E}{K_2} + \frac{l_0}{q_0}}, \quad (18)$$

illetve

$$E_e^{(0)} = \frac{E}{\frac{q_0}{l_0} \frac{E}{K_2} + 1} \quad (19)$$

értéket használják, míg *Grosbras* [3] és *Aifantis* [4] munkatársaikkal a  $K_e^{(0)} = K_e$  és  $q = q_0$  közelítések mellett fennálló

$$E_e = \frac{l}{l_0} E_e^{(0)} \quad (20)$$

formula alapján adódó

$$E_e = \frac{E}{\frac{q_0}{l_0} \frac{E}{K_2} + 1} (1 + \varepsilon_{p_0}) \quad (21)$$

érték használatát javasolják, ahol  $\varepsilon_{p_0}$  a relaxáció kezdetén fennálló képlékeny megnyúlás (1. ábra).

*Guiu* és *Pratt* [2] felhívják a figyelmet arra, hogy amennyiben a relaxáció előtti deformáció 0,01 cm/percnél nagyobb sebességgel megy végbe, akkor a berendezés relaxációját is figyelembe kell venni. Ha  $\dot{P}'$  a berendezés relaxációja miatt végbenő terhelésváltozás sebessége, akkor

$$\dot{\varepsilon}_n + \dot{\varepsilon}_r = \frac{\dot{P} - \dot{P}'}{l_0 K_2}. \quad (22)$$

Bevezetve a berendezés és az észlelt relaxáció arányára a  $\beta = \frac{\dot{P}'}{\dot{P}}$  jelölést, a nem rugalmas megnyúlás sebességére az

$$\dot{\varepsilon}_n = -\left(\frac{1}{E_e} - \frac{q_0}{l_0 K_2} \beta\right) \dot{\sigma} \quad (23)$$

összefüggés adódik. *Guiu* és *Pratt* megjegyzik, hogy megfelelő kísérleti berendezés esetén a berendezés relaxációja mindig reverzibilis és általában  $\beta \ll 1$ . A kísérleti tapasztalatok szerint ez az effektus egyébként is csak az ernyedés első 3–6 másodpercében befolyásolja a minta relaxációját.

## 2.2. A kísérleti eredmények kiértékelése

A relaxációs kísérletben felvett  $P(t)$  terhelés—idő függvény kiértékelési módszereit *De Batist* [5] összefoglaló munkája alapján ismertetjük.

Az értékelés során elsősorban arra törekedünk, hogy a mért  $P(t)$  görbére valamilyen elméletileg is értelmezhető analitikus függvényt illesszünk.

Ha a berendezés relaxációját elhanyagolhatjuk, akkor (17) szerint

$$\dot{\varepsilon}_n = -\frac{\dot{\sigma}}{E_e}.$$



Ebből  $\dot{\sigma}$ -t a  $\dot{P}$  terhelés idő-derivált segítségével kifejezve az

$$\dot{\epsilon}_n = -\frac{\dot{P}}{qE_e} + \frac{P\dot{q}}{q^2E_e} \quad (24)$$

formula adódik. Minthogy a relaxációs kísérlet során a minta keresztmetszete csak kismértékben változik, s általában  $P \ll AE_e$  a (24) összefüggés jobb oldalának második tagja elhanyagolhatóan kicsi, tehát

$$\dot{\epsilon}_n = -\frac{\dot{P}}{M}, \quad (25)$$

ahol  $M = AE_e$  állandó.

A (25) egyenletet formálisan a

$$-\dot{P} = F(P) \quad (26)$$

alakban is felírhatjuk, ahol  $F(P) = M\dot{\epsilon}_n$ . A (26) egyenlet megoldásához elsősorban a nem rugalmas alakváltozás sebességének terhelésfüggését megadó  $\dot{\epsilon}_n = \dot{\epsilon}_n(P)$  függvény ismerete szükséges.

A feszültségrelaxációs mérések értékelésére néhány egyszerű, a kísérleti eredményekhez jól illeszkedő és molekuláris modellek segítségével elméletileg is interpretálható  $F(P)$  függvény vált elfogadottá. A lineárisan viszkoelasztikus típusú anyagok esetén az

$$F_1(P) = \alpha_1(P - P_i) \quad (27)$$

a nem lineárisan viszkoelasztikus viselkedésű anyagokra pedig az

$$F_2(P) = \alpha_2(P - P_i)^m \quad (28)$$

alakú függvény jellemző.

Azon anyagok esetén, amelyekben a nem rugalmas megnyúlás termikusan aktivált folyamatok eredménye

$$F_3(P) = \alpha_3 \exp [\beta(P - P_i)] \quad (29)$$

alakú függvényt használunk. A (27), (28) és (29) függvényekben  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,  $\alpha_3$ ,  $m$  és  $\beta$  az adott anyagra jellemző állandók,  $P_0$  pedig a belső feszültség, amely alatt a relaxáció megszűnik.

A (29) függvényről azonnal leolvasható, hogy az  $\dot{\epsilon}_n = 0$  csak  $t \rightarrow \infty$  és  $P \rightarrow \infty$  esetén következne be, ami fizikai szempontból elfogadhatatlan. Ennek kiküszöbölésére az  $F(P)$  függvényt egyes szerzők az

$$F_4(P) = \alpha_4(P - P_i)^m \exp [\beta(P - P_i)] \quad (30)$$

alakban veszik fel.

Az egyes  $F(P)$  függvények rövid elméleti magyarázatára még visszatérünk. Itt csak annyit jegyünk meg, hogy a fenti egyszerű függvényalakok kiválasztásában nyilvánvalóan döntő szerepet játszott az is, hogy a (30) kivételével ezekben az esetekben a (26) differenciálegyenlet integrálja zárt alakban is megoldható.

A következőkben megadjuk a (26) egyenlet integrálját a (27), (28) és (29) alakú  $F(P)$  függvények esetén, bevezetve a dimenzió nélküli

$$\frac{\dot{P}}{\dot{P}_0} \equiv p' \quad \text{és} \quad \frac{P-P_i}{P_0-P_i} \equiv p \quad (31)$$

függvényeket, ahol  $P_0$  és  $\dot{P}_0$  a  $t=0$  időpillanatban mért értékek.

$$1. \text{ Ha} \quad -\dot{P} = \alpha_1(P-P_i)$$

akkor

$$p' = p \quad \text{és}$$

$$p = \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right), \quad (32)$$

$$\text{ahol } \tau_1 = \frac{1}{\alpha_1}.$$

$$2. \text{ Ha} \quad -\dot{P} = \alpha_2(P-P_i)^m,$$

akkor

$$p' = p^m \quad \text{és}$$

$$p = \left(1 + \frac{t}{\tau_2}\right)^{\frac{1}{1-m}}, \quad (33)$$

ahol

$$\frac{1}{\tau_2} = \alpha_2(m-1)(P_0-P_i)^{m-1}. \quad (34)$$

$$3. \text{ Ha} \quad -\dot{P} = \alpha_3 \exp[\beta(P-P_i)], \quad \text{akkor}$$

és

$$p' = \exp[-\beta(P_0-P_i)(1-p)], \quad (35)$$

$$p = 1 - \frac{1}{\beta(P_0-P_i)} \ln\left(1 + \frac{t}{\tau_3}\right), \quad (36)$$

ahol

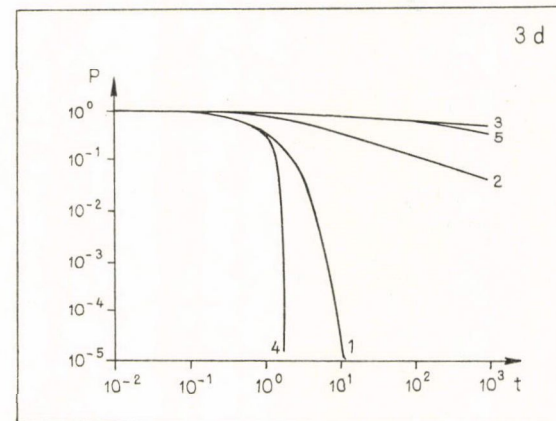
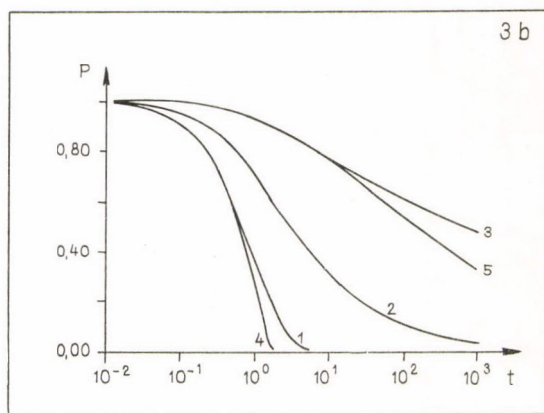
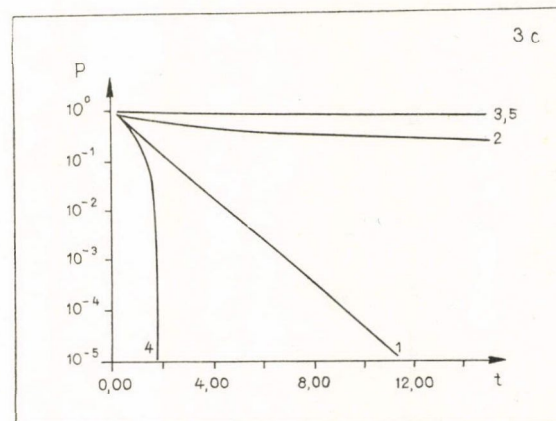
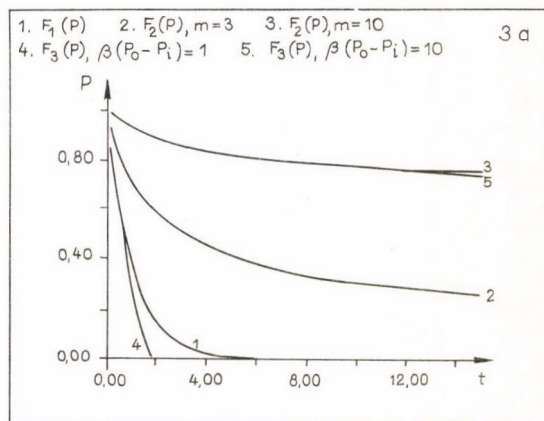
$$\frac{1}{\tau_3} = -\beta\dot{P}_0.$$

Az  $F_4(P)$  függvénykapcsolat — mint már említettük — nem vezet zárt alakban integrálható eredményre.

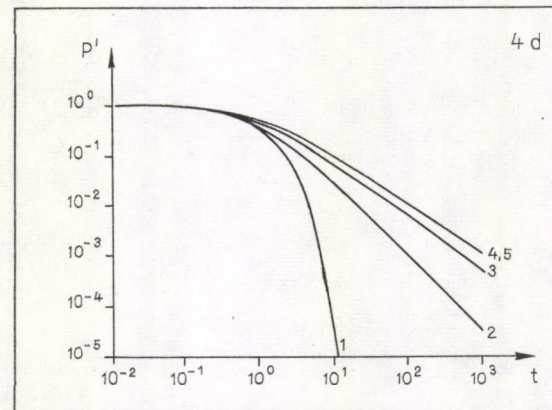
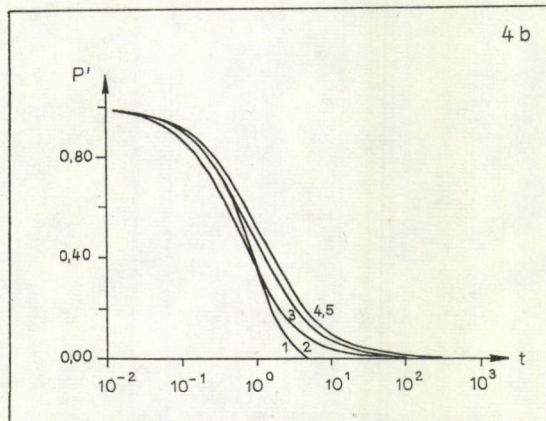
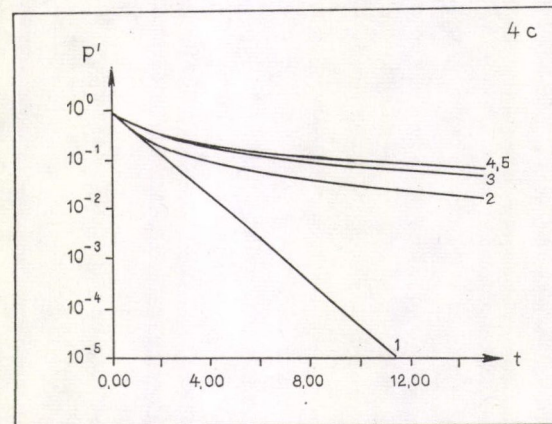
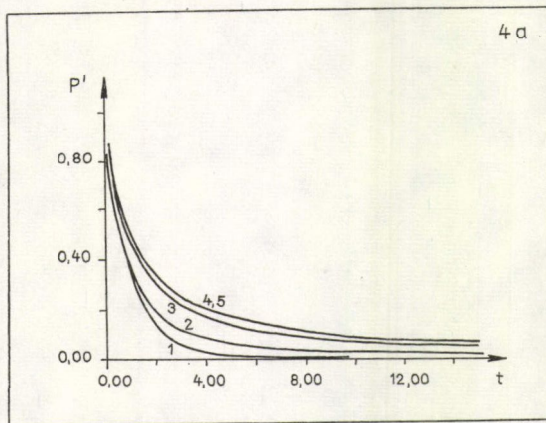
Adott mérések esetén a megfelelő  $F(P)$  függvénykapcsolat kiválasztása a mérési eredmények sokrétű grafikus feldolgozása segítségével történhet. Legcélravezetőbb a  $P=P(t)$ ,  $\dot{P}=\dot{P}(t)$  és  $\dot{P}=\dot{P}(P)$  függvények, illetve az ezeknek megfelelő  $p=p(t)$ ,  $p'=p'(t)$  és  $p'=p'(p)$  redukált függvénykapcsolatok lineáris, fél logaritmikus, illetve logaritmikus skálázással történő ábrázolása. A 3—5. ábrák [5] nyomán a (26)—(28) szerinti  $F(P)$  függvényekhez tartozó grafikonokat mutatják.

A kísérleti eredmények és a 3., 4., 5. ábrák grafikonjainak összehasonlításával eldönthető, hogy melyik  $F(P)$  függvény illeszkedik legjobban a mérési adatokhoz. Ezután a kiválasztott  $F(P)$  függvény paraméterei a megfelelő grafikonokról már leolvashatók.



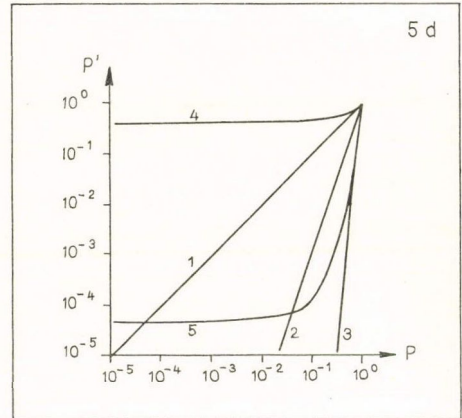
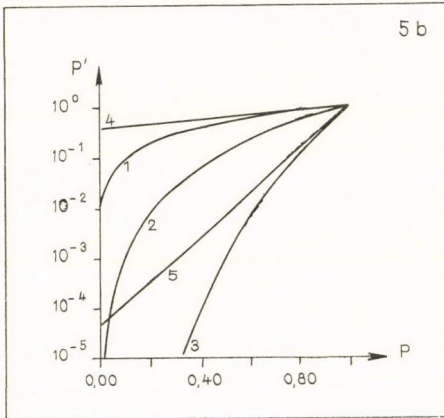
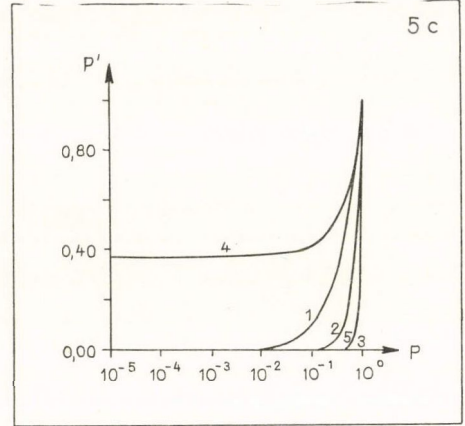
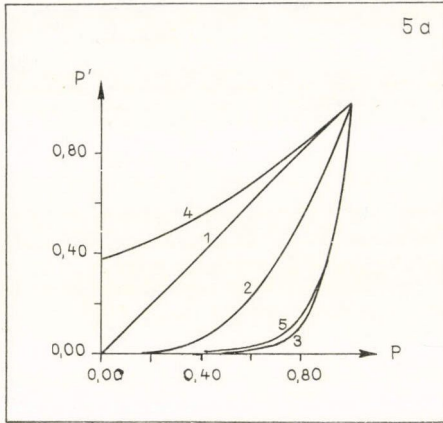


3. ábra. Normalizált terhelési-idő grafikonok



4. ábra. Normalizált terhelési sebesség-idő grafikonok.  
A görbék számozása ugyanaz, mint a 3. ábrán





5. ábra. Normalizált terhelés-terhelési sebesség grafikonok.  
A görbék számozása ugyanaz, mint a 3. ábrán

Az  $F_1(P)$  függvény  $\alpha_1$  paraméterét az

$$\ln p = -\alpha_1 t \quad (37)$$

függvénykapcsolat fél logaritmikus ábrázolásakor kapott egyenes iránytangense adja meg. A  $P_i$  belső feszültség pedig a  $P=P(t)$  függvénykapcsolat

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(t) = P_i \quad (38)$$

telítési értékével egyenlő.

Az  $F_2(P)$  függvény esetén az  $m$  kitevőt az

$$\ln p' = \frac{m}{1-m} \ln \left( 1 + \frac{t}{\tau_2} \right) \quad (39)$$

összefüggés kétszer logaritmikus ábrázolásában,  $t \gg \tau_2$  értékekre kapott egyenes szakasz  $s$  iránytangenséből az

$$s \sim \frac{m}{m-1} \quad (40)$$

formula segítségével határozhatjuk meg. Tehát

$$m = \frac{s}{s-1} \quad (41)$$

$m$  ismeretében a  $t=0$ -hoz tartozó  $p$  értékéből  $\tau_2$ -t az

$$\ln p = \frac{2-m}{1-m} \ln \tau_2 \quad (42)$$

formula alapján számíthatjuk ki.  $\tau_2$  ismeretében pedig  $P_i$  és  $\alpha_2$  értéke is meghatározható.

Az  $F_3(P)$  függvény esetén

$$\ln p' = -\ln \left( 1 + \frac{t}{\tau_3} \right) \quad (43)$$

tehát a kétszer logaritmikus ábrázolásban,  $t \gg \tau_3$  értékek esetén kapott egyenes szakasz iránytangense mindig  $s = -1$ .  $\tau_3$  ebben az esetben is a  $P(t)$  vagy  $\dot{P}(t)$  függvények kicsiny  $t$  mellett felvett értékéből határozható meg. Minthogy fennáll az

$$\frac{1}{\beta} = \dot{P}(t + \tau_3 = 1) \quad (44)$$

reláció,  $\tau_3$  ismeretében  $\beta$  értéke meghatározható.

Az  $\alpha_3$  és  $P_i$  paraméterek szerepe ebben a közelítésben nem jelentős.

A grafikus analízis segítségével a fizikailag fontos paraméterek értéke a kísérleti adatokból tehát meghatározható. Az  $F(P)$  függvény kiválasztása azonban nem egyszerű. Lehetséges például, hogy a kísérleti adatok csak több  $F_1(P)$  függvény szuperpozíciójával írhatók le, azaz egy relaxációs időspektrumot kell felvenni. Egyes esetekben problematikus az  $F_2(P)$  és  $F_3(P)$  függvények közötti választás is. Ez általában akkor következik be, ha  $s \sim -1$ . A mérési pontatlanságok miatt az

$m = \frac{s}{s-1}$  kitevő értéke is bizonytalanná válhat.

Ezek a problémák arra utalnak, hogy a kísérleti adatok analízise során többféle grafikus ábrázolás alapján kell a megfelelő  $F(P)$  függvényt és a mérési adatokkal összhangban álló paramétereket meghatározni.

### 3. A mérések elméleti értékelése

Ebben a fejezetben a mérési eredmények értelmezésekor leggyakrabban használatos elméleti modelleket ismertetjük. A modellek ismertetésekor elsősorban az előző fejezetben tárgyalt  $F(P)$  függvények elméleti megalapozására törekszünk, s az ehhez szükséges molekuláris modelleket nem részletezzük. Az összefoglaláshoz elsősorban a [3, 5–9] munkákat használjuk.



Megállapítottuk, hogy

$$F(P) = \frac{\dot{\varepsilon}_n}{M},$$

így a különböző elméleti modellekből az

$$\dot{\varepsilon}_n = \dot{\varepsilon}_n(\sigma) \quad (45)$$

függvényt kell meghatározni. Az  $\varepsilon_n$  nem rugalmas alakváltozás azonban általában az  $\varepsilon_a$  anelasztikus és  $\varepsilon_p$  képlékeny alakváltozásból tevődik össze, tehát

$$\varepsilon_n = \varepsilon_a + \varepsilon_p. \quad (46)$$

Bár a kétféle típusú alakváltozás mindig együtt jelentkezik, Hart [10] szerint a feszültségrelaxáció során a két effektus elválasztható. A következőkben először röviden foglalkozunk az  $\varepsilon_n = \varepsilon_a$  tiszta anelasztikus relaxációval, majd kissé részletesebben tárgyaljuk az  $\varepsilon_n = \varepsilon_p$  képlékeny relaxációt.

### 3.1. Anelasztikus relaxáció

Hart [10] szerint anelasztikus relaxáció esetén az  $\varepsilon_a(t)$  függvény:

- egy vagy több relaxációs idővel jellemezhető exponenciális függvény,
- a relaxáció teljes ideje alatt arányos a  $\sigma$  feszültséggel, de a relaxációs idő független a feszültségtől,

— az effektus a feszültséggel reverzibilisen változik.

A reverzibilitás miatt az anelasztikus relaxáció értelmezésekor elsősorban a viszkózus szemcsehatármozgást, az oldott atomok feszültség indukálta rendeződését és a rövid távú diszlokációmozgást (pl. kihajlás) kell figyelembe venni.

A következőkben ezekkel a mikromechanizmusokkal nem foglalkozunk, helyettük a jelenség fenomenologikus leírására kidolgozott modellt ismertetjük.

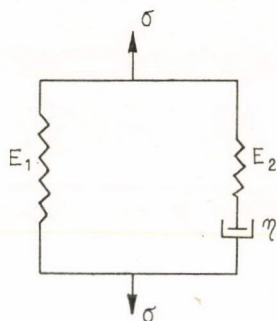
A 6. ábrán az ún. standard lineáris test modellje látható. A standard lineáris test az  $E_1$  és  $E_2$  Young-modulusokkal jellemzett tisztán rugalmas viselkedésű és egy viszkózitási együtthatójú elemből áll. A modell két ágát merev rudak kötik össze, tehát az egyes ágak relatív megnyúlása azonos.

A standard lineáris test  $\dot{\varepsilon}$  nyúlási sebessége a  $\sigma$  feszültség és az egyes alkotóelemek fizikai jellemzői segítségével az

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\sigma - E_1 \varepsilon}{\eta} + \frac{\dot{\sigma} - E_1 \dot{\varepsilon}}{E_2} \quad (47)$$

alakban fejezhető ki [11]. Minthogy a feszültségrelaxációs vizsgálat során  $\varepsilon$  állandó, tehát  $\dot{\varepsilon} = 0$ , a (47) formula a

$$\dot{\sigma} + \frac{E_2}{\eta} \sigma - \frac{E_1 E_2 \varepsilon}{\eta} = 0 \quad (48)$$



6. ábra. A standard lineáris test modellje

alakra egyszerűsödik. A (48) differenciálegyenletet megoldva a

$$\sigma = E_1 \varepsilon - (E_1 \varepsilon - \sigma_0) \exp \left[ -\frac{E_2 t}{\eta} \right] \quad (49)$$

összefüggéshez jutunk, ahol  $\sigma_0$  a feszültség értéke a relaxáció kezdetén. A 3.5. formula minőségileg jól tükrözi az 1. ábrán látható görbe alakját, s fizikailag is érthetővé teszi a jelenséget. A nyújtás során ugyanis a lineáris test mindkét ága megfeszül, mert a viszkózus elem nem követi azonnal az alakváltozást. Az  $\varepsilon$ -állandó megnyúlás beállta után azonban a viszkózus elem „kienged”, s így a feszültség lassan a tisztán rugalmas elem által megszabott  $E\varepsilon$  értékre csökken.

A (48) formulából látható, hogy az egyenlet a

$$\dot{\sigma} = \frac{E_2}{\eta} (\sigma - \sigma_i) \quad (50)$$

alakra hozható, ahol  $\sigma_i = E_1 \varepsilon$ . (50) és (27) összehasonlítása mutatja, hogy a standard lineáris test relaxációs viselkedése valóban  $F_1(P)$  típusú függvénnyel írható le.

Krausz [9] könyvében a relaxáció modellezésére a standard lineáris test mellett már bonyolultabb modelleket is ismertet, s a viszkózus elem szinuszos hiperbolikus függvény szerinti viselkedését is figyelembe veszi. Ezekkel a modellekkel azonban a továbbiakban nem foglalkozunk.

### 3.2. A képlékeny relaxáció

A fémek esetén a feszültségrelaxáció többnyire azért jön létre, mert az  $\varepsilon_r$  rugalmas deformáció  $\varepsilon_p$  képlékeny deformációvá alakul át, tehát

$$\varepsilon_n = \varepsilon_p.$$

Az  $F(P)$  függvény elméleti meghatározásához ezekben az esetekben az  $\varepsilon_p$  képlékeny alakváltozási sebesség meghatározása szükséges.

#### 3.2.1. Diszlokációs modellek

Mint hogy a képlékeny alakváltozás mindig diszlokációmozgással valósul meg,  $\dot{\varepsilon}_p$  az Orowan [12] által javasolt

$$\dot{\varepsilon}_p = \alpha b \varrho_m \bar{v} \quad (51)$$

összefüggésből határozható meg. (51)-ben  $\varrho_m$  a mobilis diszlokációsűrűség,  $b$  a Burgers-vektor,  $\alpha$  egy orientációs faktor, amelynek értéke polikristályos testekre  $1/2$  [4],  $\bar{v}$  pedig az átlagos diszlokációsebesség.

A  $\bar{v}$  átlagos diszlokációsebesség meghatározására többféle mikromodell ismeretes, ezeknek tárgyalása azonban most nem lehet feladatunk. (Igen sokféle modellt ismertet pl. Hirth és Lothe [13] könyve.)

A feszültségrelaxációs mérések értelmezése többnyire a Johnston és Gilman [14] által javasolt

$$\bar{v} = B(\sigma - \sigma_i)^m \quad (52)$$



empirikus összefüggés, vagy a termikusan aktivált diszlokációmozgást leíró

$$\bar{v} = v \exp \left[ -\frac{\Delta G(\sigma^*, T)}{kT} \right] \quad (53)$$

formula segítségével lehetséges. Az (52) formulában  $B$  és  $m$  az adott anyagra jellemző állandók. (53)-ban  $v$  a mozgó diszlokációs szakasz rezgési frekvenciája,  $k$  a Boltzmann-állandó,  $T$  a hőmérséklet,  $\Delta G$  pedig a diszlokációmozgás aktiválási energiája.

A Li [15] által javasolt analízis az (51) és (52) formula felhasználásával a

$$\dot{\sigma}^* = -\alpha b \varrho_m B E_e (\sigma^*)^m \quad (54)$$

egyenletre vezet, amely  $m$  értékétől függően az  $F_1(P)$ , illetve  $F_2(P)$  típusú empirikus összefüggésnek felel meg.

Amennyiben a diszlokációsebességet Guin és Pratt nyomán [2] az (53) formulával vesszük figyelembe, akkor (51) és (17) felhasználásával a

$$\dot{\sigma}^* = -\alpha b \varrho_m v E_e \exp \left[ -\frac{\Delta G}{kT} \right] \quad (55)$$

egyenlethez jutunk.

A Gibbs-potenciál változása a termikusan aktivált folyamat egy elemi lépése során

$$\Delta G(\sigma^*, T) = \Delta F_0 - \int_0^{\sigma^*} w d\sigma^* \quad (56)$$

ahol  $\Delta F_0$  a szabad energia, azaz a potenciálgödör teljes mélysége,  $w$  pedig az aktiválási térfogat [16]. A

$$W = \frac{1}{\sigma^*} \int_0^{\sigma^*} w d\sigma^* \quad (57)$$

formulával bevezetve a  $W$  átlagos aktiválási térfogatot, az (56) összefüggés a

$$\Delta G = \Delta F_0 - W \sigma^* \quad (58)$$

alakra egyszerűsödik. Ezzel (55) a

$$\dot{\sigma}^* = -\alpha b \varrho_m v \exp \left[ -\frac{\Delta F_0}{kT} + \frac{W \sigma^*}{kT} \right] \quad (59)$$

alakot ölti, ami az  $F_3(P)$ -vel jellemzett empirikus összefüggésnek felel meg.

A fentiekben tárgyalt modellek természetesen csak akkor alkalmazhatók, ha az  $\dot{\epsilon}_p$  kifejezésben szereplő mikroszerkezeti paraméterek ( $\varrho_m$ ,  $\sigma_i$ ,  $W$ ) a folyamat során állandónak tekinthetők. Ez a feltétel a  $\varrho_m$  mobilis diszlokációs sűrűségre általában teljesül is. Az átlagos aktivációs térfogat azonban a  $\sigma^*$  effektív feszültség függvénye. Az (57) formulában szereplő  $w$  aktivációs térfogat a mozgó diszlokáció  $b$  Burgers-vektorával és az  $A$  aktivációs területtel a

$$w = bA \quad (60)$$

alakban fejezhető ki ([13] 540. oldal). Az aktivációs terület pedig Law és Beshers [17] mérései szerint az

$$A = A_{\infty} + \frac{C}{\sigma^*} \quad (61)$$

formulának megfelelően  $\sigma^*$  függvénye, ahol  $C$  egy állandó. (60) és (61) felhasználásával a 3.13. átlagos aktiválási térfogat a

$$w = bA_{\infty} + \frac{bC}{\sigma^*} \ln \frac{\sigma^*}{\sigma_e^*} \quad (62)$$

alakban adódik. Itt  $\sigma_e^* \neq 0$ , egy effektív feszültségérték, amelyet azért kell bevezetnünk, hogy az (57) integrál konvergencia maradjon. Ez a feltétel összhangban van azzal a 2. pontban már említett ténnyel, hogy az  $F_3(P)$  alakú függvénnyel a feszültségrelaxációnak csak egy tartománya írható le, hiszen  $t \rightarrow \infty$  esetén  $F_3(P)$  nem teljesíti a  $\sigma^* \rightarrow 0$  követelményt. A  $\sigma_e^*$  érték éppen azt az effektív feszültségértéket jelöli ki, ameddig az  $F_3(P)$  függvényt érvényesnek tekintjük.

A (62) aktiválási térfogat felhasználásával (59) a

$$\sigma^* = -K\sigma^{*m} \exp \left[ \frac{bA_{\infty}\sigma^*}{kT} \right] \quad (63)$$

alakot ölti, ahol  $K$  (59) és (62)-ből adódó állandó, és

$$m = \frac{bC}{kT}. \quad (64)$$

De Batist és Callens [6] felhívják a figyelmet arra, hogy (63)  $bA_{\infty}\sigma^* \ll kT$  esetén  $F_2(P)$  alakú, és  $bA_{\infty}\sigma^* \gg kT$  esetén pedig  $F_4(P)$  alakú függvénybe megy át.

Bengus és Smirnov [18] a diszlokációs modellekkel kapcsolatban megállapítja, hogy az egyes diszlokációs szakaszokra általában különböző belső feszültség hat. A relaxáció leírásakor a

$$\dot{\tau} = -\frac{K_e b}{S_g^2} \cos^2 \psi \dot{S} \quad (65)$$

egyenletből indulnak ki, amelyben  $\dot{\tau}$  a csúszósíkban a csúszás irányába eső feszültség változási sebessége,  $S_g$  a csúszósík területe,  $\psi$  a csúszási irány és a terhelés iránya által bezárt szög,  $\dot{S}$  pedig a diszlokációmozgás területi sebessége. Az  $\dot{S}$  területi sebesség az egyes diszlokációk adataival az

$$\dot{S} \sim \sum_{j=1}^N l_j v_j \quad (66)$$

alakban fejezhető ki, ahol  $l_j$  a  $j$ -edik diszlokációs szakasz hossza és  $v_j = v_j(\tau - \tau_{ij})$ , tehát a  $j$ -edik diszlokáció sebessége a  $j$ -edik diszlokációra ható effektív feszültség



függvénye. (65) és (66) szerint a relaxáció a

$$\frac{d\tau}{dt} = -\frac{K_e b}{S_g^2} \cos^2 \psi \sum_{j=1}^N l_j \frac{d\xi_j}{dt}, \quad (67)$$

$$\frac{d\xi_j}{dt} = v_j(\tau - \tau_i(\xi_j)), \quad j = 1, 2, \dots, N$$

differenciálegyenlet-rendszerből határozható meg. (67)-ben  $\xi_j$  a  $j$ -edik diszlokáció helykoordinátája. A szerzők az egyenletrendszert az

$$x = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^N l_j \xi_j \quad (68)$$

új változó bevezetésével a

$$\frac{d\tau}{dt} = -K_e \frac{bL}{S_g^2} \cos^2 \psi \frac{dx}{dt} \quad (69)$$

$$\frac{dx}{dt} = v_0(\tau - gx)$$

alakra hozzák, ahol  $L = \sum_{j=1}^N l_j$ ;  $g = \frac{d\tau_i(\xi)}{d\xi}$ , a (68)-cal definiált új  $x$  változó pedig értelemszerűen a mozgó diszlokációsokaság tömegközéppontja. A (69) egyenlet-rendszert a szerzők a szokásos

$$v = v_0[\tau - \tau_i(x)]^m \quad (70)$$

és a ritkábban használatos

$$v = v_0 \operatorname{sh} \frac{W(\tau - \tau_i)}{kT} \quad (71)$$

sebességformula felhasználásával is megoldják. A (70) sebességfüggvény esetén a  $\tau^*$  effektív feszültségre hatvány, illetve exponenciális időfüggés, a (71) esetén pedig  $\ln$  szerinti időfüggés adódik. A teljes relaxációs mélységre mindkét modellből a

$$\Delta\tau = \frac{A(\tau - gx_0)}{A + g} \quad (72)$$

értéket kapjuk, ahol  $A = \frac{K_e bL}{S_g^2} \cos^2 \psi$ ,  $x_0$  pedig a tömegközéppont helykoordinátája a kezdő pillanatban. A modell szerint a relaxációt a diszlokációsokaság tömegközéppontjának mozgása szabja meg, s a relaxáció akkor fejeződik be, ha a tömegközéppont eléri egyensúlyi helyzetét. Minthogy a tömegközéppont mozgása nem egyezik meg az egyes diszlokációk mozgásával, a tömegközéppont helykoordinátája Bengus és Smirnov szerint a  $\varrho_m$  mobilis diszlokációsűrűséggel egyenrangú paraméter a relaxáció leírásában.

## 3.2.2. Fenomenologikus, illetve „félmikro” modellek

Sleeswyk és társai [19] a Hart-féle [10] keményedési elméletből kiindulva határozzák meg a  $\dot{\sigma} = \dot{\sigma}(\sigma)$  összefüggést. Levezetésükben feltételezik, hogy a  $(\partial\sigma/\partial \ln \dot{\varepsilon}_p)_{\varepsilon_p}$  sebesség érzékenységi paraméter a relaxáció során állandó, valamint, hogy az alakítási keményedés csak a képlékeny alakváltozás függvénye, tehát

$$\left( \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon_p} \right)_{\dot{\varepsilon}_p} = f(\varepsilon_p). \quad (73)$$

Hart nyomán feltételezve, hogy  $\sigma = \sigma(\varepsilon_p, \dot{\varepsilon}_p)$  felírhatjuk a

$$d\sigma = \left( \frac{\partial \sigma}{\partial \ln \dot{\varepsilon}_p} \right)_{\varepsilon_p} d \ln \dot{\varepsilon}_p + \left( \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon_p} \right)_{\dot{\varepsilon}_p} d\varepsilon_p \quad (74)$$

összefüggést, majd ennek kis átalakításával a

$$\left( \frac{\partial \sigma}{\partial \ln \dot{\varepsilon}_p} \right)_{\varepsilon_p} = \frac{d\sigma}{d \ln \dot{\varepsilon}_p} \left[ 1 - \left( \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon_p} \right)_{\dot{\varepsilon}_p} \frac{d\varepsilon}{d\sigma} \right] \quad (75)$$

formulát. A (17) formula és  $E_e$  (20) közelítésével adódik, hogy

$$\frac{d\varepsilon}{d\sigma} = \frac{C}{1 + \varepsilon_p}, \quad (76)$$

ahol  $C = \frac{1 + \frac{q_0}{l_0} \frac{E}{K_2}}{E}$ . Így (75)-ből a (76), valamint (73) és (74) felhasználásával a

$$\left( \frac{\partial \sigma}{\partial \ln \dot{\varepsilon}_p} \right)_{\varepsilon_p} = \alpha \quad (77)$$

egyenlethez juthatunk, ahol  $\alpha$  egy állandó. (77)-et átalakítva adódik, hogy

$$d\sigma = \alpha \frac{d\dot{\varepsilon}_p}{\dot{\varepsilon}_p}. \quad (78)$$

A (78) differenciálegyenlet megoldása:

$$\sigma - \sigma_0 = \alpha (\ln \dot{\varepsilon}_p - \ln \dot{\varepsilon}_{p_0}), \quad (79)$$

amiből

$$\dot{\varepsilon}_{p_0} e^{\frac{\sigma - \sigma_0}{\alpha}} = \dot{\varepsilon}_p \quad (80)$$

a Sleeswyk-féle tárgyalás tehát  $F_3(P)$  típusú összefüggésre vezet.

Grimwall, Kubat és Rigdhahl [7] az  $F_3(P)$  típusú összefüggés elméleti alátámasztására félmikro modellt alkottak. Elképzelésük szerint a feszültségrelaxáció — szinte minden anyag esetén tapasztalható —  $\sigma \sim \ln t$  logaritmikus tartománya geometriai eredetű, s az anyag mikroszerkezetétől független. Feltevésüket arra alapozzák, hogy kísérleti tapasztalatok [20, 21] szerint a  $w$  átlagos aktiválási térfogat

$$w = \frac{mkT}{\sigma_0} \quad (81)$$



függvény szerint változik, ahol  $m$  egy állandó, melynek értéke anyagtól függetlenül

$$m = 10 \pm 1. \quad (82)$$

Ily módon a szerzők a relaxáció sebességét az  $F_3(P)$ -nek megfelelő

$$\dot{\sigma}^* = -\exp \left[ -\frac{m(\sigma_0^* - \sigma^*)}{\sigma_0^*} \right] f(\sigma^*, T, v') \quad (83)$$

alakban veszik fel. (83)-ban az  $f$  függvény  $\sigma^*$ -gal lassan változik, s az anyag mikro-szerkezetétől a  $v'$  paraméteren keresztül függ. Ennek megfelelően az aktiválási térfogat

$$w = kT \frac{\partial \ln \dot{\sigma}^*}{\partial \sigma^*} \quad (84)$$

definíció szerint történő meghatározásakor (83)-ban csak az exponenciális tényező ad lényeges járulékot.  $\dot{\sigma}^*$  (83) alakjának magyarázatára a következő modellt javasolják. A relaxációt adott térfogatot elfoglaló cellákban végbemenő elemi eseményekre bonthatjuk. A relaxáció akkor fejeződik be, amikor az anyagot a relaxált cellák sűrűn kitöltik. Az egyes cellákban végbemenő elemi esemény azonban sokféle mikroesemény által valósulhat meg, s a már relaxált cellák korlátozzák a relaxálatlan cellák mikroeseményeinek számát. Tegyük fel, hogy a relaxált cella hatására a szomszédos cella mikroeseményeinek száma  $q < 1$ -gyel arányosan csökken, és legyen a szomszédos cellák száma  $p$ . Amennyiben a relaxáció arányát a

$$d = \frac{\sigma_0^* - \sigma^*}{\sigma_0^*} \quad (85)$$

hányadossal jellemezzük, egy adott cella szomszédságában  $kd$  relaxált cella található, így a cellában lehetséges mikroesemények száma  $q^{kd}$ -szeresére változik.

A relaxáció  $\dot{\sigma}^*/\sigma_0^*$  relatív sebessége arányosnak tekinthető a relaxálatlan cellákban lehetséges mikroesemények számával, azaz

$$\frac{\sigma^*(d)}{\sigma_0^*} \sim (1-d) q^{kd}. \quad (86)$$

Ez a kifejezés az

$$m' = \frac{1}{d} \ln \frac{1}{q^{kd}(1-d)} \quad (87)$$

helyettesítéssel a

$$\sigma^*(d) \sim \sigma_0^* \exp \left[ -m' \frac{\sigma_0^* - \sigma^*}{\sigma_0^*} \right]$$

alakra hozható. A formális átalakítás jogosságát az bizonyítja, hogy a  $k=13$  [22, 23] és  $q=\frac{1}{2}$  érték mellett  $0 < d < 0,8$  esetén (87)-ből az  $m' \approx 10$  érték adódik. A modell tehát megegyezik a kísérleti tapasztalatokkal.



### 3.2.3. A modellek közötti kapcsolat

A különböző modellek eredményeinek összeegyeztetésére többféle módszer is született. Eddig Aifantis és Gerberich [4], valamint Grosbras és társai [3] foglalkoztak leg részletesebben ezzel a kérdéssel.

Aifantis és Gerberich az [54] formulán alapuló Li-féle analízis és Sleswyk termodinamikai modellje között állapít meg ekvivalencia relációkat. Levezetésük azonban alapvetően hibás, hiszen a Li-féle eljárás egy  $F_2(P)$  típusú, tehát hatványfüggvény szerint változó, a Sleswyk-modell pedig  $F_3(P)$  típusú, tehát exponenciális függvény szerint változó kifejezéssel írható le. Aifantis és Gerberich mindkét modellből az  $\ln(-\dot{\sigma})$  kifejezést származtatja. A Li-analízis alapján az

$$\ln(-\dot{\sigma}) = K^{**} + \frac{m}{1-m} \ln\left(\frac{t}{\tau_2} + 1\right), \quad (88)$$

a Sleswyk-modellből pedig az

$$\ln(-\dot{\sigma}) = \ln K_0 + \frac{\sigma - \sigma_0}{\alpha} \quad (89)$$

eredményre jutnak, ahol  $\tau_2$  a (34) formula szerint adódó érték, amelyben  $\alpha_2 = \varphi Q_m b B E_e$ ,  $K^{**} = \ln \alpha_2 - \frac{m}{m-1} \ln \alpha_2 \tau_2$  és  $K_0 = \ln E_e \dot{\epsilon}_{p0}$ . (88) és (89) formális egyenlővé tételéből a

$$K^{**} = \ln K_0 \quad (90)$$

és

$$\frac{\sigma - \sigma_0}{\alpha} = \frac{m}{1-m} \ln\left(\frac{t}{\tau} + 1\right) \quad (91)$$

ekvivalencia relációkhoz juthatunk. Ezek a relációk azonban — mint arra Grosbras és munkatársai [3] rámutatnak — az egyes modellek alapfeltevéseivel ellentmondó eredményre vezetnek.

Kimutatható pl., hogy (90) teljesülése esetén

$$\frac{d\sigma}{d \ln \dot{\epsilon}_p} = \frac{m}{\sigma^*}, \quad (92)$$

ami az  $m = \text{állandó}$  miatt ellentmond a Sleswyk-modell (60) alatti kiinduló feltevésének.

Hasonló módon téves a Lloyd és társai [24] által megadott

$$m = \frac{V \sigma^*}{kT} \quad (93)$$

feltétel is, amellyel a Li [15], illetve Guiu és Pratt [2] által alkotott modell eredményeit kívánják összeegyeztetni.

Véleményünk szerint az egyes modellek összeegyeztethetőségét az  $F(P)$  függvények formai azonossága alapján bírálhatjuk el. Így összeegyeztethető eredményekre juthatunk a Guiu és Pratt, valamint a Sleswyk-modell alapján, amint ezt Batist is megállapítja [5], s ugyanebbe a kategóriába tartozik a félmikro modell [7] is, mert



mindhárom elképzelés  $F_3(P)$  típusú  $\dot{\sigma} = \dot{\sigma}(\sigma)$  függvénykapcsolatra vezet. Li modellje azonban a fenti modellekkel összeegyeztethetetlen.

A különböző típusú modellek közötti kapcsolatok meghatározása konkrét vizsgálatokban azért fontos, mert segítségükkel a fenomenologikus és mikroszerkezeti jellemzők közötti összefüggéseket tárhatunk fel.

#### 4. Összetett vizsgálati módszerek

Az előzőekben az állandó hőmérsékleten végzett feszültségrelaxációs vizsgálatokkal foglalkoztunk. Egyes esetekben célszerű lehet a különböző hőmérsékleten végzett relaxációs kísérletek összehasonlítása, valamint a relaxációs és állandó nyújtási sebesség mellett végzett mérések kombinált alkalmazása. Alden [25] felhívja a figyelmet arra, hogy a hőmérsékletfüggő képlékeny alakváltozások formálisan két elmélettel írhatók le. Az elméletek egyik típusa a termikusan aktivált folyamatok feltételezésén alapul és ennek keretében a képlékeny alakváltozás maga is termikusan aktivált folyamat. Az elméletek másik típusa szerint a deformáció hőmérséklettől független, az anyag mikroszerkezete azonban termikusan változik. Ez utóbbi elmélet szerint a képlékeny folyást nem gátolják aktivációs akadályok, s a feszültség termikus aktiváció nélkül is képes a képlékeny alakváltozás létrehozására. A képlékeny alakváltozás sebességét ekkor az

$$\dot{\epsilon}_p = \frac{\dot{\sigma} + r}{\theta_y} A_r \quad (94)$$

formulával adhatjuk meg, ahol  $\theta_y$  az alakítási keményedési,  $r$  pedig a megújulási paraméter.

Alden kifejti, hogy a kétféle elmélet csak különböző körülmények között alkalmazható, s a feszültségrelaxációs kísérlet alapján egyszerűen eldönthető, hogy adott anyag esetén melyik elméletet kell alkalmazni. A feszültségrelaxációs kísérletben a keresztfej  $t=0$  időpillanatban történő megállítása előtti  $-dt$  és a megállítás utáni  $dt$  időpillanatban mért  $\dot{\epsilon}_p$  alakváltozási sebességekre a termikusan aktivált folyamatok esetén az

$$\frac{\dot{\epsilon}_p(t = -dt)}{\dot{\epsilon}_p(t = dt)} = 1 \quad (95)$$

összefüggés áll fenn, míg a megújulási elmélet szerint ez a hányados a

$$z = \frac{\dot{\epsilon}_p(t = -dt)}{\dot{\epsilon}_p(t = dt)} = \frac{r}{\dot{\sigma} + r} \quad (96)$$

formula szerint változik. A (96) arány tehát csak kicsiny  $\dot{\sigma}$  értékek esetén egységnyi. A szerző Al ötvözeteken növekvő összenyomás mellett különböző hőmérsékleteken végzett relaxációs mérései szerint a (96) arány adott hőmérséklet mellett a terhelés változásával közel lineárisan növekedett, de legfeljebb a 0,7–0,9 értéket érte el, így az adott anyag esetén a keményedést és a megújulást is figyelembe kell venni a relaxáció vizsgálatokban.

Abe és társai [26] a (94) arány vizsgálatával kimutatták, hogy  $z < 1$  esetén a folyásfeszültség teljes egészében az anyag belső feszültségéből származik,  $z = 1$



esetén azonban a folyásfeszültséget a belső feszültség és a súrlódási feszültség együttesen határozza meg.

A relaxációs kísérlet során végbemenő keményedési és megújulási folyamatok miatt bekövetkező mikroszerkezeti változások befolyásolhatják a diszlokációsűrűséget és az aktiválási térfogatot, s így az előzőekben tárgyalt egyszerű elméleti modellek érvényüket veszíthetik. Az Abe és társai által javasolt módszer azért hasznos, mert a fenti hatásokat kiküszöböli, hiszen a mérés igen rövid időtartamra korlátozható.

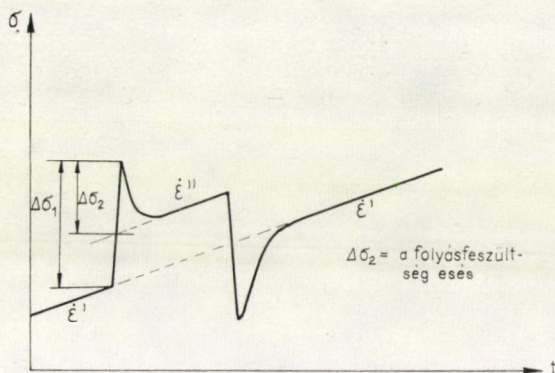
Megállapítottuk, hogy amennyiben az aktiválási térfogat és a diszlokációsűrűség állandó, akkor az aktiválási térfogat az  $\ln(-\dot{\sigma}) \sim \sigma$  egyenes iránytangenséből állapítható meg. *Rodriguez és társai* [27] kimutatták, hogy ez a grafikon akkor is egyenes marad, ha az aktiválási térfogat és a diszlokációsűrűség a

$$\frac{d^2 \ln(\alpha \rho_m b v)}{d\sigma^2} + \frac{1}{kT} \frac{dW}{d\sigma} = 0 \quad (97)$$

összefüggésnek megfelelően változik. Grosbras és társai [3] szerint negatív görbületű  $\ln(-\dot{\sigma}) \sim \sigma$  grafikon esetén a Li-féle modellt kell alkalmazni, a pozitív görbületű esetekben pedig a megújulási folyamatokat is figyelembe kell venni. Ez utóbbi esetben a megújulás a belső feszültség változását kifejező

$$\dot{\sigma}_i = B \exp C\sigma_i \quad (98)$$

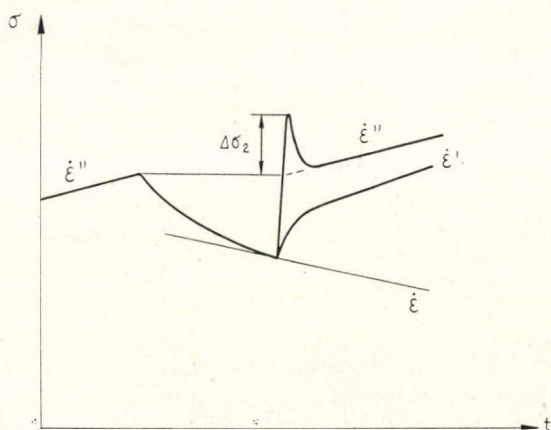
kinetikával vehető figyelembe.



7. ábra. A nyújtási sebesség hirtelen megváltoztatás után bekövetkező feszültségváltozás sémája

*Frölich és Grau* [28] különböző nyújtási sebességgel történő vizsgálatokat kombináltak relaxációs mérésekkel az aktiválási térfogat meghatározására. A nyújtási sebesség hirtelen változtatásakor folyásfeszültség esés, a terhelés hirtelen változtatásakor pedig úgynevezett késési időtartam lép fel. A 7. ábrán a hirtelen sebességnövekedés, illetve sebességcsökkenés esetén bekövetkező jelenség sémája látható. A 8. ábra pedig az  $\dot{\epsilon}''$  sebességgel történő nyújtás után végzett relaxációs görbét, majd az újabb  $\dot{\epsilon}'$ , illetve  $\dot{\epsilon}''$  sebességgel történő nyújtást követő effektust ábrázolja. Látható, hogy a hirtelen sebességváltoztatás után  $\dot{\epsilon} \neq 0$  mellett is relaxációs jelenség





8. ábra. Relaxáció közben végzett hirtelen nyújtáskor bekövetkező feszültségváltozás sémája

játszódik le, melynek során a folyásfeszültség  $\Delta\sigma_2$ -vel csökken. Amennyiben a hirtelen sebességváltoztatás alatt  $\dot{\epsilon}_0$  és  $W$  állandónak tekinthető, akkor a feszültség időbeli változása a

$$\Delta\sigma = -\frac{1}{V} \ln \left\{ \left( 1 - \frac{\dot{\epsilon}'}{\dot{\epsilon}''} \right) \exp \left( -\frac{V}{M} \dot{\epsilon}'' t \right) - \frac{\dot{\epsilon}'}{\dot{\epsilon}''} \right\}$$

függvénnyel írható le. A sebességváltozás pillanatában pedig fennáll a

$$\left( \frac{d\sigma}{d\epsilon_p} \right)_{\sigma=\sigma_A} = \frac{1}{\frac{1}{E} + \frac{1}{E_e} \frac{\dot{\epsilon}'}{\dot{\epsilon}'' - \dot{\epsilon}'}}$$

összefüggés, ahol  $\sigma_A$  a feszültség értéke a sebességváltozás pillanatában.

Fröhlich és Grau elméletileg is bizonyítják, valamint NaCl kristályon végzett kísérletekkel illusztrálják, hogy az  $\dot{\epsilon}''$  sebességgel történő nyújtás után bekövetkező relaxációhoz található olyan  $\dot{\epsilon}'$  nyújtási sebesség, amellyel a folyásfeszültség esés jelensége elkerülhető (8. ábra). Dotsenko és Landau [29] rézminták esetén széles hőmérsékleti tartományban alkalmazták a Fröhlich és Grau által javasolt vizsgálati módszert, s megállapították, hogy a minta keményedését csak 77 K alatt kell figyelembe venni.

Sleeswyk és Maathuis [30] a kis ciklusszámú fárasztás során bekövetkező feszültségrelaxációt vizsgálva megállapítják, hogy a relaxációs szakaszokban diszlokáció-sokszorozódás tapasztalható. A további összetett vizsgálati módszerek ismertetése túlságosan messzire vezetne, ezért csak megemlítjük, hogy gyorsuló nyújtás és feszültségrelaxáció kapcsolatával foglalkozik pl. Krausz és Eyring [9], valamint több relaxációs kísérlet egymásutánjából von le következtetéseket Gajducenija és Blistanov [31].

## IRODALOM

1. D. Lee and E. W. Hart, *Met. Trans.* 2, 1245, 1971.
2. F. Guu and Pratt, *phys. stat. sol.* 6, 111, 1964.
3. M. Grosbras, E. Dedieu and M. Cahoreau, *phys. stat. sol. (a)* 42, 449, 1977.
4. E. C. Aifantis and W. W. Gerberich, *Mater. Sci. Eng.* 21, 107, 1975.
5. R. De Batist, *Rev. Def. Beh. Materials*, 1, 71, 1975.
6. R. De Batist and A. Callens, *phys. stat. sol. (a)* 21, 591, 1974.
7. G. Grimwall, J. Kubat, M. Rigdahl, *Mater. Sci. Eng.* 27, 45, 1977.
8. Brájer L., Kovács I. és Tasnádi P., *Magy. Fiz. Foly.* 23, 442, 1975.
9. A. S. Krausz, H. D. Eyring: *Deformation Kinetics*, Wiley and Sons, New York, 1975.
10. E. W. Hart, *Acta Met.* 18, 599, 1970.
11. Kovács I., *Fiz. Szle.* 22, 324, 1972.
12. E. Orowan, *Proc. Phys. Soc.* 52, 8, 1940.
13. J. P. Hirth and J. Lothe: *Theory of Dislocations*, McGraw-Hill, New York, 1968.
14. W. G. Johnston and J. J. Gilman, *J. Appl. Phys.* 30, 129, 1959.
15. J. C. M. Li, *Can. J. Phys.* 45, 493, 1967.
16. T. Surek, M. J. Lutton and J. J. Jonas, *Phil. Mag.* 27, 425, 1972.
17. C. C. Law and D. N. Beshers, *Scripta Met.* 6, 635, 1972.
18. V. Z. Bengus and S. N. Smirnov, *Mater. Sci. Eng.* 27, 73, 1977.
19. A. W. Sleeswyk, G. H. Boersma, G. Hut and D. J. Verel, 2nd Intern. Conf. on Strength of Metals and Alloys, Am. Soc. Metals, 1970. Vol. I. p. 204.
20. P. Feltham, *Phil. Mag.* 8, 989, 1963.
21. P. Feltham and A. Hawkins, *Mater. Sci. Eng.* 17, 239, 1975.
22. J. D. Bernal, *Nature*, 183, 141, 1959.
23. F. W. Smith, *Can. J. Phys.* 42, 304, 1964.
24. D. J. Lloyd, P. J. Worthington and J. D. Embury, *Phil. Mag.* 22, 1147, 1970.
25. T. H. Alden, *Met. Trans.* 8A, 1675, 1977.
26. K. Abe, H. Yoshinaga and S. Morozumi, *Trans. J. I. M.* 18, 479, 1977.
27. P. Rodriguez, J. L. Mannan, S. S. Vagarelli and K. G. Samuel, *Scripta Met.* 7, 671, 1973.
28. F. Fröhlich and P. Grau, *phys. stat. sol. (a)* 14, 115, 1972.
29. V. J. Dotsenko and A. J. Landau: *Mater. Sci. Eng.* 22, 101, 1976.
30. A. W. Sleeswyk and W. S. T. Maathuis, 4th Int. Conf. on Strength of Metals and Alloys, Nancy, 1976. Vol. I. p. 356.
31. V. F. Gajducenija and A. A. Blistanov, *Mehanizmi relax. javlenij v tvjordih telah*, Nauka, Moszkva, 1972, p. 59.





# A KÉPLÉKENY ALAKÍTÁS VIZSGÁLATI MÓDSZEREI

## 6. A KÉPLÉKENY ALAKVÁLTOZÁS VIZSGÁLATA BELSŐSÚRLÓDÁS MÉRÉSEL

VÖRÖS GYÖRGY

ELTE, Általános Fizika Tanszék

### TARTALOM

1. Bevezetés .....	75
2. Az anelasztikus jelenségek fenomenológiai leírása .....	75
3. Az anelasztikus testek modelljei .....	77
4. Mérési módszerek .....	79
5. Képlékeny alakítással összefüggő mérési eredmények .....	81
6. Irodalom .....	84

### 1. Bevezetés

Belsősúrlódás méréssel általában a vizsgált anyagok anelasztikus tulajdonságait tanulmányozzuk. A mérés során a minta deformációja olyan kicsiny, hogy maradó alakváltozás az esetek többségében nem jön létre. A képlékeny alakítás azonban jelentősen megváltoztatja a testek anelasztikus tulajdonságait. Ennek segítségével, tehát belsőúrlódás méréssel is vizsgálhatóvá válik a képlékeny alakítás. A képlékeny alakítás vizsgálatára vonatkozó mérési eredmények áttekintése előtt röviden összefoglaljuk a méréssel kapcsolatos elméleti ismereteket és a különböző mérési módszereket.

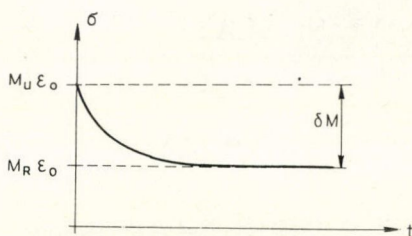
### 2. Az anelasztikus jelenségek fenomenológiai leírása

Az anelasztikus test adott feszültség hatására bekövetkező alakváltozását a következőképpen jellemezhetjük: a feszültség és deformáció között lineáris egyértékű függvénykapcsolatot tételezünk fel, az egyensúly beállításához véges időre van szükség. Ez az idő nem a véges hangsebesség, hanem az anelasztikus hatások jelenléte miatt szükséges. Példaként említhetjük az egyszerű nyújtásnál fellépő anelasztikus feszültségrelaxációt [1]. A testet  $\varepsilon_0$  nyúlási deformációnak alávetve először  $M_u \varepsilon_0$  feszültséget kell alkalmaznunk.  $M_u$ -t relaxálatlan modulusznak nevezzük. Az idő növekedtével az  $\varepsilon_0$  deformáció fenntartásához egyre kisebb feszültség elegendő. Végtelen idő elteltével  $M_R \varepsilon_0$  feszültség szükséges (1. ábra).  $M_R$  a relaxált moduluszt jelenti. Természetesen  $M_u > M_R$  és  $M_u - M_R = \delta M$ . A modulusz időfüggéséről tehát a következőket tudjuk:

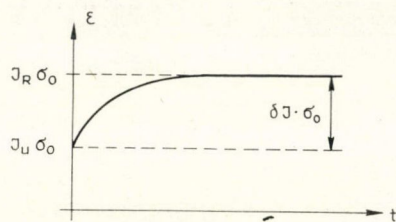
$$M(t = 0) = M_u, \quad M(t = \infty) = M_R. \quad (1)$$

Ehhez a jelenséghez teljesen hasonlóan folyik le az anelasztikus kúszás. Itt  $\sigma_0$  feszültséget alkalmazunk, és vizsgáljuk a test időbeli nyúlását. Ez kezdetben  $J_u \cdot \sigma_0$  és végtelen idő elteltével  $J_R \sigma_0$  nagyságú. Itt  $J$ -vel a nyúlási moduluszt jelöltük.





1. ábra. Anelasztikus feszültségrelaxáció



2. ábra. Anelasztikus kúszás

Az indexek jelentése az előzőkkel azonos (2. ábra), és  $J_R - J_u = \delta J$ , valamint:

$$J(t = 0) = J_u, \quad J(t = \infty) = J_R. \quad (2)$$

Az anelasztikus testekre érvényes a Boltzmann-féle szuperpozíció elv, amely a következőt mondja ki: Ha a testre a  $t'$  időpillanatban  $d\sigma(t')$  feszültséggel hatunk, akkor a  $t$  időpillanatban létrehozott deformáció növekmény

$$d\varepsilon(t) = C(t-t')d\sigma(t')$$

nagyságú. Folyamatos terhelés esetén (ismert  $\sigma(t)$  függvényt feltételezve):

$$\varepsilon(t) = \int_{-\infty}^t C(t-t') \frac{d\sigma(t')}{dt'} dt'. \quad (3)$$

Hasonlóan ismert  $\varepsilon(t)$  deformáció eléréséhez

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t K(t-t') \frac{d\varepsilon(t')}{dt'} dt' \quad (4)$$

feszültséget kell alkalmaznunk.  $C(t-t')$  és  $K(t-t')$  függvények a relaxációra jellemzőek.

Anelasztikus testet periodikus igénybevétellel terhelve könnyen megmutatható, hogy a  $\sigma$  és  $\varepsilon$  között fáziskülönbség lesz, azaz belsőúrlódási jelenség észlelhető. Legyen a feszültség  $\sigma = \sigma_0 e^{i\omega t}$  alakú és helyettesítsük ezt a (3) kifejezésbe, azaz

$$\varepsilon(t) = i\omega \int_{-\infty}^t \sigma_0 C(t-t') e^{i\omega t'} dt',$$

és hajtsunk végre  $k = t - t'$  azaz  $dt' = -dk$  helyettesítést, akkor

$$\varepsilon(t) = \sigma_0 i\omega e^{i\omega t} \int_0^{\infty} C(k) e^{-i\omega k} dk. \quad (5)$$

Az (5) kifejezésben az integrál a  $C(t-t')$  relaxációs függvény  $\mathcal{F}(C)$  Fourier-transzformáltját állítja elő. (5) átírható az

$$\varepsilon(t) = \sigma_0 i\omega e^{i\omega t} \mathcal{F}(C) = \sigma(t) J^*(\omega) \quad (6)$$

alakba. Itt  $J^*(\omega)$ -val a komplex nyúlási moduluszt jelöltük. Teljesen hasonló módon,  $\varepsilon(t)$ -t ismerve a feszültség a

$$\sigma(t) = \varepsilon(t) M^*(\omega) \quad (7)$$

formulával adható meg. A (6) és (7) kifejezésekben  $M^*$  és  $J^*$

$$M^* = M_1 + iM_2, \quad J^* = J_1 + iJ_2 \quad (8)$$

részekre bontható.

A feszültség és deformáció közötti fáziseltolódást az ismert

$$\operatorname{tg} \Phi = \frac{M_2}{M_1} \quad (9)$$

alakban kapjuk meg. A fázisszög tangense a veszteséges rezgő rendszerek jellemzésére használt jósági tényező reciprokával egyenlő:

$$\operatorname{tg} \Phi = Q^{-1}. \quad (10)$$

Ezt tekintjük a belső súrlódás mértékének.

### 3. Az anelasztikus testek modelljei

A valóságban az  $M_1$  és  $M_2$  mennyiségeket nem ismerjük. Ezért az anelasztikus anyagokat modell-tekkel helyettesítjük és a modellből  $M_1$  és  $M_2$  már meghatározható. Természetesen a modell helyességét  $M_1$  és  $M_2$  mérésével állapítjuk meg.  $M_1$  a rugalmas állandó méréséből,  $M_2$  pedig a belső súrlódásból határozható meg. Általános esetben  $\sigma$  és  $\varepsilon$  között a következő differenciálegyenletet tételezzük fel:

$$\sigma + a_1 \dot{\sigma} + a_2 \ddot{\sigma} + \dots = \varepsilon + b_1 \dot{\varepsilon} + b_2 \ddot{\varepsilon} + \dots \quad (11)$$

A gyakorlatban elegendő az első, különleges esetben a második deriváltakra szorítkozni. A legegyszerűbb esetben (standard lineáris test) a  $\sigma$  és  $\varepsilon$  közötti kapcsolatot a következő:

$$\tau_e \dot{\sigma} + \sigma = M_R \varepsilon + \tau_e M_u \dot{\varepsilon}. \quad (12)$$

$\tau_e$  a folyamatra jellemző relaxációs időt jelöli. A (12) egyenlet megoldása feszültség-relaxáció esetére a következő:

$$M(t) = M_R + (M_u - M_R) e^{-t/\tau_e}. \quad (13)$$

Periodikus terhelés esetén a modulusz valós része:

$$M_1 = M_R + \frac{\delta M \omega^2 \tau_e^2}{1 + \omega^2 \tau_e^2}, \quad (14)$$

és képzetes része

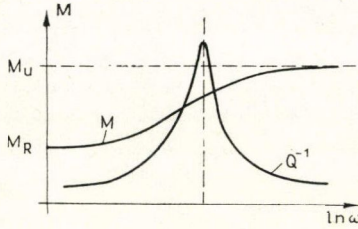
$$M_2 = \delta M \frac{\omega \tau_e}{1 + \omega^2 \tau_e^2} \quad (15)$$

alakú. A két modulusz hányadosa adja a belső súrlódás nagyságát:

$$Q^{-1} = \frac{\delta M}{M_R} \frac{\omega \tau_e}{1 + \omega^2 \tau_e^2}. \quad (16)$$



A modulusz és belső súrlódás frekvenciafüggése a 3. ábrán látható. A (15), (16) kifejezésekből azt kapjuk, hogy a modulusznak inflexió pontja, a belső súrlódásnak maximuma van az  $\omega\tau=1$  helyen. A folyamathoz tartozó  $Q$  aktiválási energia is ennek alapján határozható meg. Ugyanis a relaxációs idő a



$$\tau = \tau_0 e^{\frac{Q}{kT}} \quad (17)$$

alakban függ a hőmérséklettől. Adott frekvencián mérve egy  $T_p$  hőmérsékleten teljesül a belső rezonanciafeltétel, azaz

$$\tau(T_p)\omega = 1. \quad (18)$$

3. ábra. A standard lineáris test moduluszának és belső súrlódásának frekvenciafüggése

Ha az egyenlet logaritmusát vesszük, akkor  $\ln \omega - t T_p^{-1}$  függvényében ábrázolva egyenest kapunk, amelyből  $\tau_0$  és  $Q$  meghatározható.

Bonyolultabb esetben a relaxációs jelenséget megkísérélhetjük leírni folytonos relaxációs spektrummal rendelkező modellekkel. A  $\tau$  és  $\tau+d\tau$  relaxációs idők közé eső időállandóval rendelkező folyamat

$$\delta M^\tau = Y(\ln \tau) d(\ln \tau)$$

modulusváltozást okoz. A teljes relaxáció

$$\delta M = \int_{-\infty}^{+\infty} Y(\ln \tau) d(\ln \tau)$$

változást hoz létre. A (13), (14), (15) kifejezésekkel összhangban a modulusz valós és képzetes része a következőképpen adható meg:

$$M_1 = M_R + \int_{-\infty}^{+\infty} Y(\ln \tau) \frac{\tau^2 \omega^2}{1 + \omega^2 \tau^2} d(\ln \tau), \quad (19)$$

$$M_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} Y(\ln \tau) \frac{\tau \omega}{1 + \tau^2 \omega^2} d(\ln \tau).$$

A gyakorlatban nem közvetlenül a belső súrlódást mérjük. Rezonancia módszerekkel a rezgő minta csillapodásának  $\alpha$  időállandóját határozzuk meg. Ez a jósági tényezővel az

$$\alpha = \frac{1}{2} \frac{\omega}{Q} \quad (20)$$

kapcsolatban van. Akusztikus hullámok csillapodásának vizsgálatakor az

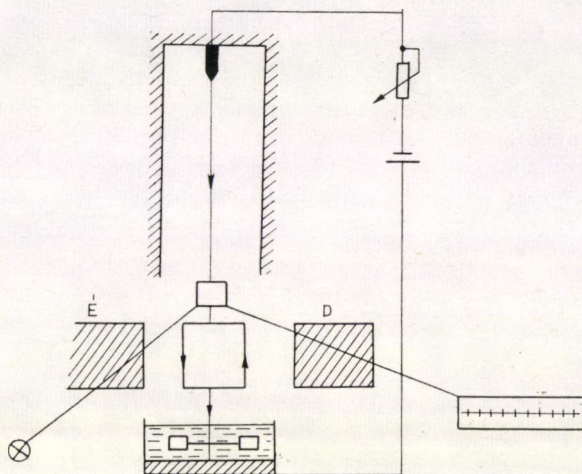
$$\alpha = \frac{1}{2} \frac{\omega}{c} Q^{-1} \quad (21)$$

formulát használjuk, amelyben  $c$  a hang terjedési sebességét jelenti.



#### 4. Mérési módszerek

A különböző mérési módszereket a vizsgált minta deformációjának sebessége szerint szokás csoportosítani. A leglassúbb vizsgálati módszer a kvázisztatikus mérési módszer [2]. A berendezés vázlata a 4. ábrán látható. A függőleges minta egy cső-kályhában foglal helyet és a felső vége rögzített. Alsó végére tükröt és árammal átjárt vezető keretet szerelnek, amelyre egy permanens mágnes az áram nagyságától függő

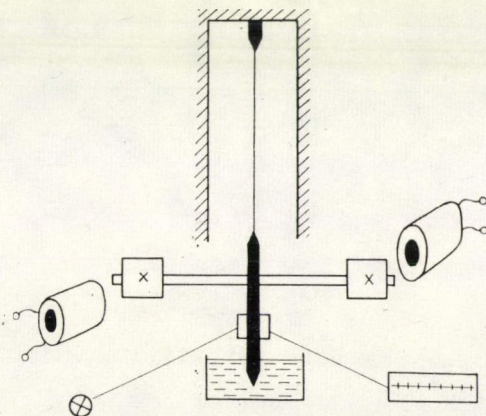


4. ábra. Kvázisztatikus torziós mérleg

forgatónyomatékokat gyakorol. A minta tehát torziós szálként viselkedik, elfordulását a tükr segítségével vetítjük ki egy kb. 5 m távolságra levő ernyőre. Az alsó befogás végén csillapító berendezés található. Az elérhető mérési pontosság  $\varepsilon \sim 10^{-7}$ /osztás. A berendezés sztatikus relaxációk vizsgálatára alkalmas.

A torziós inga [3], vagy Kê inga az előző berendezéshez hasonló (5. ábra). A vezető keretet felcseréljük változtatható tehetetlenségi nyomatékú tömegekkel és ezeken keresztül elektromágnesekkel gerjesztjük a mintából és a tömegekből álló rezgő rendszert. Az alkalmazott frekvenciák 0,1 és 4 Hz között változnak. A legkisebb mérhető belső súrlódás  $Q^{-1} \approx 10^{-5}$ .

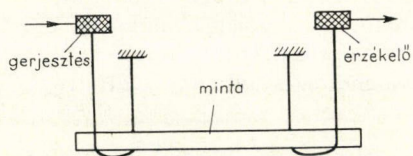
A 6. ábrán látható Förster-féle gerjesztési móddal 1—100 KHz-es frekvencia érhető el [4]. A legkisebb mérhető belső súrlódás  $10^{-7}$  értékű. A minta két vékony drótkengyelben fekszik. A drótszálak a rezgő minta cso-



5. ábra. Kê-inga,  $10^{-5}$  nagyságú belső súrlódás mérésére alkalmas a 0,1—4 Hz frekvenciatartományban



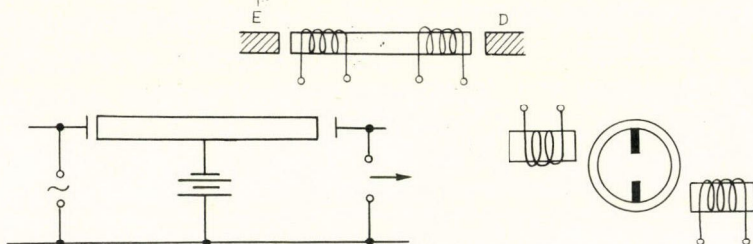
mópontjainak közelében helyezkednek el. A drótszalak másik vége piezoelektromos érzékelőhöz, illetve gerjesztőhöz csatlakozik. A 7. ábrán különféle gerjesztési módokat láthatunk. A 7a. ábra örvényáramos gerjesztést mutat, amely



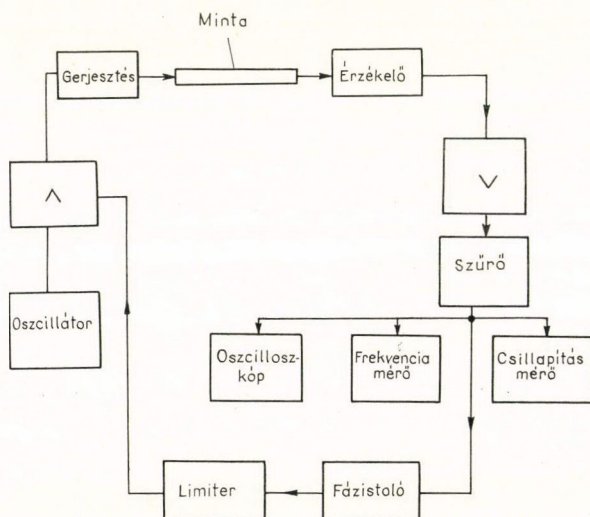
6. ábra. Förster típusú mérőrendszer

nemferromágneses anyagoknál is használható és longitudinális hullámokat kelt. A 7b. ábra kapacitív gerjesztést és érzékelést mutat longitudinális hullámok vizsgálatára. A kondenzátorokat a minta és a végei közelében elhelyezett lemez fegyverzetek hozzák létre.

A 7c. ábrán torziós hullámok gerjesztésére alkalmas elrendezést látunk. A minta alaplapjára a tengelyével párhuzamosan két ferromágneses anyagdarabkát rögzítünk és ezek segítségével elektromágnesekkel a mintában torziós hullámokat keltünk. Bármely gerjesztési mód esetén az érzékelő és gerjesztő berendezések között pozitív visszacsatolást hozhatunk létre. A visszacsatoló körben az egyes alkatrészek hatásának kompenzálására fázistolót és a véges amplitúdó eléréséhez limitert kell használnunk (8. ábra).

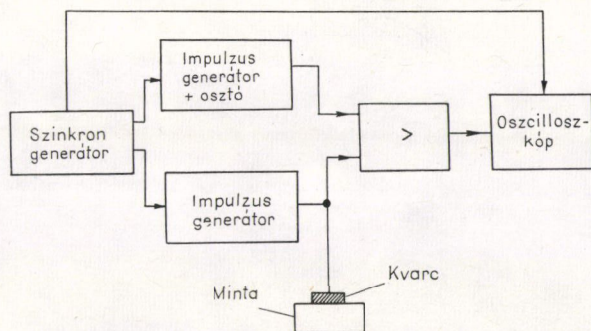


7. ábra. Különböző gerjesztő és érzékelő rendszerek Förster típusú berendezéshez



8. ábra. Automatizált Förster-berendezés kapcsolási vázlata





9. ábra. Hiperszonikus mérési módszer kapcsolási rendszere

A hiperszonikus mérési módszer vázlata a 9. ábrán látható [5]. A berendezés működése a következő: A szinkrongenerátor jele két impulzusegenerátort indít, ezek egy-egy rövid hullámvonulatot bocsátanak ki. Az egyik generátor jele osztón és erősítőn keresztül egy oszcilloszkópra jut. A másik generátor jele egy kvarckristályt gerjeszt. A kvarc valamely rezgési módusa megegyezik a hullámvonulat domináns frekvenciájával. A kvarckristály akusztikus hullámot kelt a hozzárögzített mintában. A hullám a minta végéről visszaverődve eléri a kvarcot. Ekkor a kristály mint detektor érzékeli a jelet és erősítőn keresztül az oszcilloszkópra juttatja. Az oszcilloszkóp ernyőjén egyszerre jelenik meg a két jel. A kezdetük közötti távolságból a rugalmas állandó határozható meg. Az osztó segítségével a csillapítatlan jel nagysága beállítható úgy, hogy azonos amplitúdójú legyen a mintából érkező jellel. Így meghatározható lesz a csillapítás nagysága is. Az alkalmazott kvarc optimális mérete  $\varnothing = 1-2$  cm. Ezzel a módszerrel 1 MHz—1 GHz frekvencia érhető el. Az 1—3 GHz tartományban CdS és ZnS vékony rétegeket alkalmaznak [6]. 100 GHz felett újból kvarcot gerjesztenek, de nem rezonancia frekvencián [7].

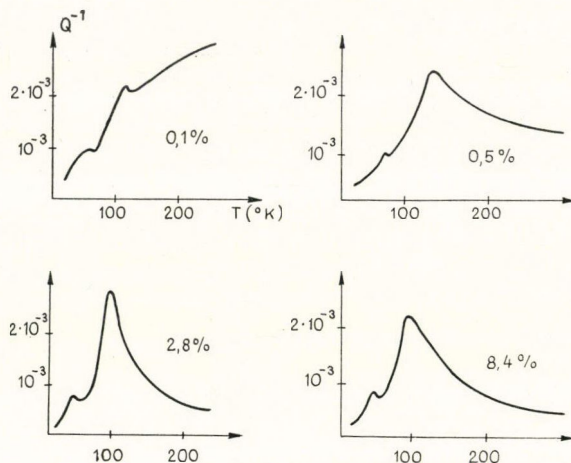
## 5. Képlékeny alakítással összefüggő mérési eredmények

Egy diszlokáció mozgással összefüggő belső súrlódási jelenséget *Bordoni* vizsgált 1949-ben [8]. Polikristályos réz belső súrlódását mérte 10 kHz-es frekvencián különböző mértékű hidegalakítások után a hőmérséklet függvényében (10. ábra). A 11. ábra a Bordoni-csúcs megszűnését mutatja hőkezelés hatására. A mérést 1,1 kHz frekvencián hajlító rezgésekkel végezték. 8,4% hidegalakítás hatását az A jelű görbe mutatja, a B és C görbék 1 óra 180° és 1 óra 350 °C-os hőkezelés után mutatják a belső súrlódást.

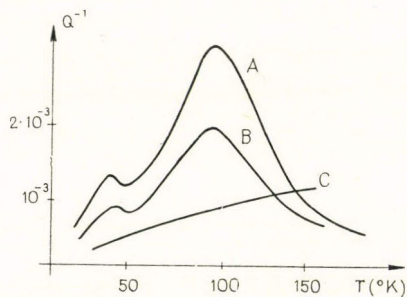
A 12. ábrán látható belső súrlódási csúcs 0,016%  $N_2$ -t tartalmazó acélban jelentkezik 30%-os előzetes csavarás után [9]. Az effektus Snoek—Köster-csúcs néven ismeretes. A mérést 1 Hz-es torziós rezgésekkel végezték. A csúcs létrejötté szennyezőatom-diszlokáció kölcsönhatással kapcsolatos.

Réz egykristályon 30 kHz-es longitudinális hullámokkal mért amplitúdó függő belső súrlódást mutat a 13. ábra [10]. Az A görbe a hőkezelt, a B, C, D gör-

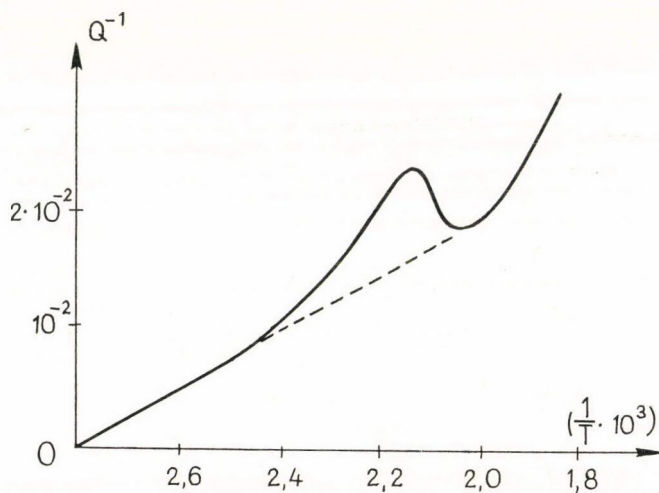




10. ábra. Bordoni-csúcs kialakulása a hidegalakítás hatására



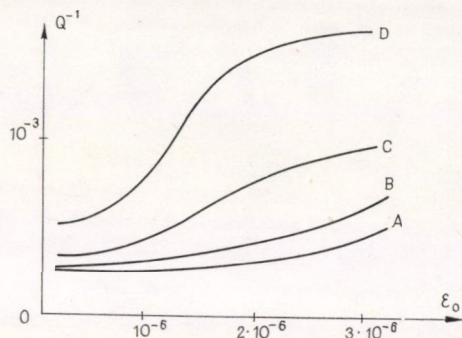
11. ábra. A Bordoni-csúcs megszűnése hőkezelés után



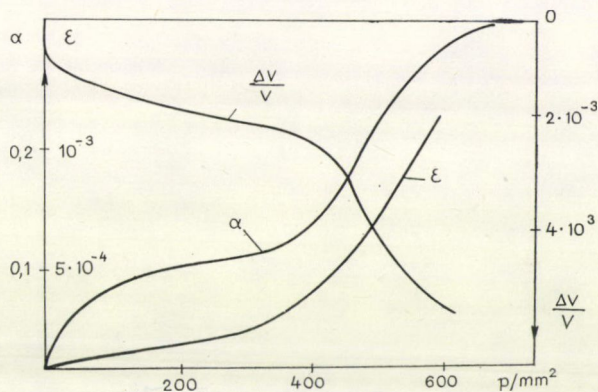
12. ábra. Snoek—Köster-effektus nitrogén tartalmú acélban különböző mértékű deformáció után

bék 0,045, 0,09, 0,113 kp/mm<sup>2</sup> feszültséggel deformált minták belső súrlódását mutatják a gerjesztés amplitúdójának függvényében.

Sztatikus feszültség alatt végzett mérések közül egy 4 MHz-es akusztikus hullámokkal történt vizsgálatot mutatunk a 14. ábrán [11]. A mérést jól hőkezelt



13. ábra. Réz egykristály amplitúdó függő belső súrlódása

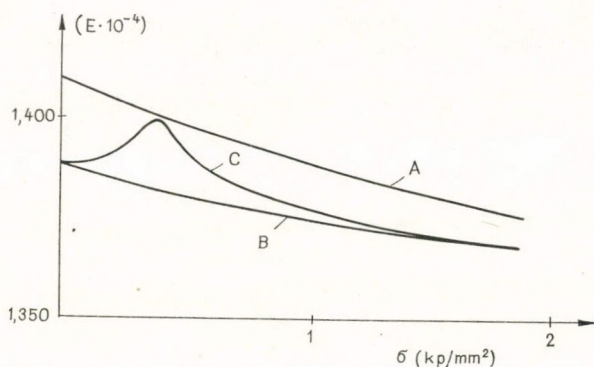


14. ábra. Nagy tisztaságú feszültség alatt levő Al minta deformációja, belső súrlódása és modulusz változása a sztatikus feszültség hatására

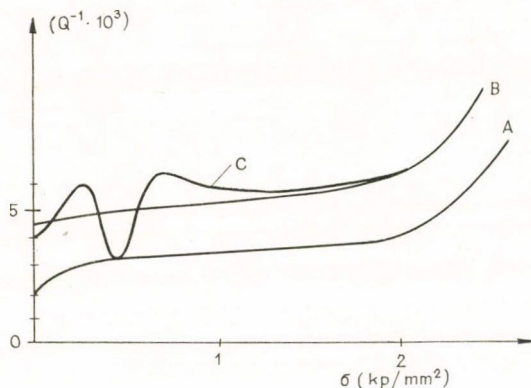
99,999% tisztaságú Al-mal végezték, 0,1% deformáció után. Az ábrán a belső súrlódás ( $\alpha$ ), a moduluszváltozás ( $\Delta v/v$ ) és a megnyúlás ( $\epsilon$ ) látható a húzófeszültség függvényében. Kb. 350 p/mm<sup>2</sup> nagyságú feszültség hatására megindul a diszlokációs sokszorozódás és ez változtatja meg a görbék menetét.

Végezetül egy sztatikus feszültség alatt végzett alacsonyfrekvenciás mérést mutatunk be a 15. ábrán [12]. Az A jelű görbe 700°-on 1 órát hőkezelt, a B jelű 0,6%-os deformáció után, a C jelű a deformáció után 6 nappal mutatja a Young-moduluszt a sztatikus feszültség függvényében. A 16. ábra az előző görbékhez tartozó belső súrlódást mutatja. A 6 napos szobahőmérsékletű hevertetés alatt a minta 400 p/mm<sup>2</sup> feszültséggel volt terhelve. A 400 p/mm<sup>2</sup> feszültség környezetében kialakult csúcsok megjelenése a szennyező diszlokáció kölcsönhatással kapcsolatos.





15. ábra. Tiszta réz modulusának feszültségfüggése, alacsony frekvenciás tartományban



16. ábra. Tiszta réz belső súrlódása a sztatikus feszültség függvényében

#### IRODALOM

1. A. S. Nowick and B. S. Berry: Anelastic Relaxation in Crystalline Solids, Academic Press, New York, 1972.
2. T. S. Kê, Phys. Rev. 71, 533, 1947.
3. T. S. Kê, Phys. Rev. 72, 41, 1947.
4. F. Förster, Z. Metallk. 29, 109, 1937.
5. R. Truett, C. Elbaum and B. B. Chick: Ultrasonic Methods in Solid State Physics, Academic Press, New York, 1969.
6. N. F. Foster, Proc. IEEE, 53, 1400, 1965.
7. I. Ilukor, E. H. Jacobsen: Physical Acoustic, Academic Press, New York 1968.
8. P. G. Bordoni, Ricerca Sci. 19, 851, 1949.
9. I. L. Snoek, Physica 8, 711, 1941.
10. T. A. Read, Phys. Rev. 58, 371, 1940.
11. A. Vincent, I. Perez and P. F. Gobin, J. Phys. 32, 651, 1971.
12. Vörös Gy., Egyetemi doktori disszertáció, ELTE, 1977.

# A KÉPLEKÉNY ALAKÍTÁS VIZSGÁLATI MÓDSZEREI

## 7. ALAKÍTOTT FÉMEK VIZSGÁLATA RÖNTGEN VONALPROFIL ANALÍZISSEL

UNGÁR TAMÁS

ELTE, Általános Fizika Tanszék

### TARTALOM

1. Bevezetés .....	85
2. A RDV Fourier analízise .....	86
3. A vonalszélesedés vizsgálatának Warren és Averbach módszere .....	88
4. A vonalszélesedés Krivoglaz—Wilkens modellje .....	90
5. Vonaleltolódás .....	91
6. Irodalom .....	92

### 1. Bevezetés

A röntgen diffrakciós vonalak (RDV) kiszélesedésének és eltolódásának vizsgálata hasznos módszernek bizonyult az alakított fémek és ötvözetek mikroszerkezetének és belső deformációs állapotának vizsgálatára [1—9]. A diszlokációsűrűség meghatározásának direkt módszerei, a topográfia, a transzmissziós elektronmikroszkópia, vagy a maratási módszer nem alkalmazhatók, ha a diszlokációsűrűség megközelíti a  $10^{10}/\text{cm}^2$ , vagy ennél nagyobb értékeket. Ilyen esetekben az alakítással bevitt diszlokációk és más kristályhibák vizsgálatának lehetséges módszerei a tárolt energiának, az elektromos ellenállásnak, lassú neutronok kisszögű szórásának, magrezonancia vonalszélesedésének és a RDV kiszélesedésének, illetve eltolódásának a mérése. Valamennyi felsorolt módszer igen érzékeny a mintában levő szennyezők eloszlására. A kristályhibák és a szennyezők által okozott effektusok általában azonos formában jelentkeznek és ezért mind kísérleti, mind elméleti szétválasztásuk nehézségeket okozhat.

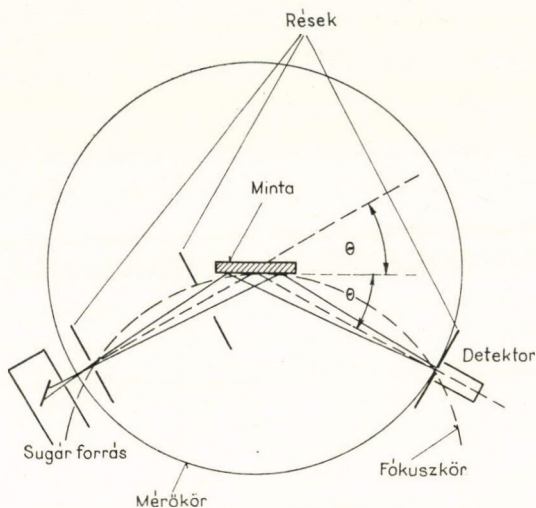
Amennyiben a szennyezők hatásától eltekintünk, a RDV szélesedését a mintegy 1000 Å-nél kisebb átmérőjű koherensen szóró tartományok, az alakítással bevitt diszlokációk, a szemcsehatárok és a rétegződési hibák okozzák. A RDV eltolódása rétegződési hibáknak és a mintában megmaradó vagy a mérés közben kívülről alkalmazott makroszkopikus feszültségnek tulajdonítható.

A RDV kiszélesedésének a vizsgálati módszere a Fourier-analízis. A vonaleltolódás vizsgálata történhet a szokásos, fotografikus Debye—Scherrer-módszerrel, vagy a Bragg-reflexiók helyének számlálócsöves, diffraktométeres mérésével.



## 2. A RDV Fourier analízise

A RDV intenzitás eloszlásának mérése általában a Bragg—Brentano-elven működő, számlálócsöves diffraktométerrel történik. Az ennek megfelelő sugármenet az 1. ábrán látható. A minta általában egy sík felület, amelynek a normálisa a mintára beeső és a mintáról szórt sugárnyaláb által bezárt szög szögfelezője irányába



1. ábra. Diffraktométer  
Bragg—Brentano-fókuszálással

mutat. Ugyanakkor a beeső és a szórt nyaláb iránya, valamint a minta felületének normálisa egy síkban fekszenek. A számlálócső, vagy detektor ugyanebben a síkban fekvő kör mentén mozog, miközben a fenti feltételek állandóan teljesülnek. Ennek megfelelően a detektor és a minta ugyanazon tengely körül mozognak és míg a detektor a direkt nyaláb irányához képest  $2\theta$ , addig a minta  $\theta$  szöggel fordul el.

Megfelelő hőkezelésekkel elvileg elérhető, hogy a minta teljesen rekristallizált és teljesen feszültségmentes állapotban legyen. Az ilyen mintának megfelelő Bragg-reflexiók intenzitáseloszlása, illetve vonalszélessége az alkalmazott röntgensugárzás természetes vonalszélességéből, a rések okozta résszórásból, a röntgen sugárnyaláb divergenciájából és a diffraktométer elkerülhetetlen geometriai pontatlanságából tevődik össze.

Ezeket a hatásokat összefoglalóan instrumentális vonalszélességnek nevezzük. Az ennek megfelelő intenzitáseloszlást egy adott Bragg-reflexió esetén jelöljük a továbbiakban  $i(2\theta)$ -val, ahol  $2\theta$  a diffrakció szöge.

Az alakított mintának megfelelő Bragg-reflexiók intenzitáseloszlását — amit egyébként „mért profilnak” nevezhetünk — jelöljük  $m(2\theta)$ -val. A diszlokációk, a véges krisztallitméret, a rétegződési hibák és egyéb kristályhibák okozta vonalszélesedésnek megfelelő intenzitáseloszlás legyen  $f(2\theta)$ . Ezt az intenzitáseloszlást szokás fizikai profilnak nevezni.

Könnyen belátható, hogy a mért profil a fizikai és az instrumentális profilok konvolúciója lesz:

$$m(2\theta) = \int f(t) i(t - 2\theta) dt. \quad (1)$$

A Fourier-transzformáció és a konvolúció közötti jól ismert összefüggésnek megfelelően

$$F(m) = F(f) \cdot F(i), \quad (2)$$

ahol  $F$ -fel jelöltük az egyes függvények Fourier-transzformáltját.

A Fourier-analízis célja végső soron az, hogy a mérhető „mért” és „instrumentális” profilok ismeretében előállítsuk a „fizikai” profilt. Ezt a műveletet az ún. Stokes-korrektció módszerével hajthatjuk végre [10].



A RDV intenzitáseloszlásának a meghatározása általában úgy történik, hogy az adott Bragg-reflexió szélességének megfelelő, alkalmasan választott szögtartományban, meghatározott számú pontban megmérjük a szórt sugárzás intenzitását. Ez az ún. „step-by-step” mérési módszer.

Jelöljük az adott  $(hkl)$  Miller-indexekkel jellemzett Bragg-reflexió esetén a mérési pontok számát  $N$ -nel. Ez azt jelenti, hogy mind az  $i(2\theta)$ , mind az  $m(2\theta)$  intenzitáseloszlás függvények  $N-N$  számú pontban vannak megadva. A Fourier-transzformáltak helyett kézenfekvő Fourier-összegek alakjában megadni az  $i$ ,  $m$  és  $f$  függvényeket, mégpedig a következő alakban:

$$i(s) = \sum_{n=1}^N \{G_n^r \cos [2\pi na_3(s-s_0)] + G_n^i \sin [2\pi na_3(s-s_0)]\}, \quad (3)$$

$$m(s) = \sum_{n=1}^N \{H_n^r \cos [2\pi na_3(s-s_0)] + H_n^i \sin [2\pi na_3(s-s_0)]\}, \quad (4)$$

$$f(s) = \sum_{n=1}^N \{A_n \cos [2\pi na_3(s-s_0)] + B_n \sin [2\pi na_3(s-s_0)]\}. \quad (5)$$

A fenti kifejezésekben a  $2\theta$ -val jelölt diffrakciós szög helyett áttértünk az  $s$  diffrakciós vektorra:

$$s-s_0 = \frac{2a_3 \sin \theta}{\lambda} - \frac{2a_3 \sin \theta_0}{\lambda}. \quad (6)$$

$\theta_0$  az adott Bragg-reflexió valamilyen alkalmasan választott középpontja (pl. az intenzitáseloszlás maximuma, vagy súlypontja stb.), más szóval az „exakt” Bragg-helyzet.  $\lambda$  a sugárzás hullámhossza,  $a_3$  pedig a  $(hkl)$  Miller-indexű hálózati síkseregben a síkok egymástól való távolsága, vagyis  $a_3 = d(hkl)$ .

A (3)–(5) Fourier-összegekben a diffrakciós szögről a diffrakciós vektor abszolút értékére való áttérés annak felel meg, hogy a röntgen diffrakció a reciprok térbe való leképezést jelent, amelynek az „igazi” koordinátája a diffrakciós vektor. A Fourier-összegekre vonatkozó általános szabályok alapján a fizikai profil Fourier-együtthatói a következő módon adhatók meg:

$$A_n = \frac{H_n^r G_n^r + H_n^i G_n^i}{G_n^{r2} + G_n^{i2}}, \quad (7)$$

$$B_n = \frac{H_n^i G_n^r - H_n^r G_n^i}{G_n^{r2} + G_n^{i2}}. \quad (8)$$

A fenti két kifejezés a röntgen vonalprofil analízisben a Stokes-korrektció [10]. Az  $A_n$  és  $B_n$  Fourier-együtthatók segítségével most már egyszerűen előállítható az  $f(s)$  „fizikai” profil. További kérdés ezután, hogy milyen kapcsolatot lehet teremteni egy tiszta fém vagy ötvözet deformációs állapota és ezen „fizikai” profil között.



### 3. A vonalszélesedés vizsgálatának Warren és Averbach módszere

Warren és Averbach [2], valamint Bertaut [11] az alakított fémek röntgen-szórását két részre bontották: a részecskemérettől és a deformációktól származó szórásra. Megmutatták, hogy az alakítás következtében kiszélesedett RDV Fourier-együtthatói két tényező szorzatára bonthatók, amelyek közül az egyik függ az adott reflexió rendjétől, a másik viszont nem. Az előbbieket a deformációkkal, az utóbbiakat a szemcsemérettel hozták kapcsolatba. A Fourier-együtthatóknak a két tényezőre bontását éppen a rendszámától való eltérő függés teszi lehetővé.

Warren és Averbach elmélete röviden a következő módon tekinthető át. Egy tetszőleges módon alakított fém vagy ötvözet egy elemi cellájának a helyvektorát írjuk a következő alakban:

$$\vec{R}_m = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3 + \delta(m_1, m_2, m_3), \quad (9)$$

ahol  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  és  $\mathbf{a}_3$  a kristály rácsvektorai,  $m_1, m_2$  és  $m_3$  egész számok és  $\delta_m$  a kiszemelt elemi cella elmozdulása az átlagkristályban elfoglalt helyéhez képest.

A szórt röntgensugárzás intenzitáseloszlása a  $(hkl)$  Miller-indexű Bragg-reflexió esetében, a következő módon írható:

$$f(s) \cong \sum_m \sum_{m'} \exp \left\{ 2\pi i \left[ h_1(m_1 - m'_1) + h_2(m_2 - m'_2) + h_3(m_3 - m'_3) + \frac{s - s_0}{\lambda} (\delta_m - \delta_{m'}) \right] \right\}, \quad (10)$$

ahol  $m$  az  $m_1, m_2, m_3$  számhármast jelenti és az összegzést az  $m, m'$  elemi cellapárookra kell elvégezni.

A  $\delta$  deformációs vektort írjuk fel a kristály rácsvektoraival:

$$\delta_m = X_m \mathbf{a}_1 + Y_m \mathbf{a}_2 + Z_m \mathbf{a}_3. \quad (11)$$

Az egyszerűség kedvéért (ugyanakkor az általánosság megszorítása nélkül) a továbbiakban vizsgáljuk meg a szórt sugárzás intenzitáseloszlását egy  $\langle 00l \rangle$  típusú reflexió esetén. Vezessük be a következő jelöléseket:

$$n = m_3 - m'_3 \quad \text{és} \quad Z_n = Z_{m_3} - Z_{m'_3}. \quad (12)$$

Az  $n$  egész szám nyilvánvalóan a távolságot jelenti a  $\langle 00l \rangle$  kristálytani irányban,  $\mathbf{a}_3$  rácsvektornyi egységekben.

Így a (10) kifejezés a következő alakban írható:

$$f(s) = \sum_{m_1} \sum_{m_2} \sum_n N_n \langle \exp(2\pi i l Z_n) \rangle \exp(2\pi i n h_3), \quad (13)$$

ahol  $N_n$  azoknak az elemi celláknak a száma, amelyeknek van  $n$ -edik szomszédjuk a  $\langle 00l \rangle$  irányban. Legyen  $N_3$  ugyanebben az irányban az elemi cellák száma, így a (10) és (13) kifejezések alapján  $f$  a következő Fourier-sor alakjában írható fel:

$$f(s) \cong \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{A_n \cos(2\pi n h_3) + B_n \sin(2\pi n h_3)\}, \quad (14)$$

ahol

$$A_n = \frac{N_n}{N_3} \langle \cos(2\pi l Z_n) \rangle, \quad (15)$$

$$B_n = -\frac{N_n}{N_3} \langle \sin(2\pi l Z_n) \rangle. \quad (16)$$

A (13), (15) és (16) kifejezésekben a hegyes zárójelek a  $\langle 00l \rangle$  irányban történő átlagolást jelentik.

A (15) kifejezésben az első tényező a kristály méretével, a második a belső deformációkkal kapcsolatos, ezért kézenfekvő a következő jelölések bevezetése:

$$A_n = A_n^S \cdot A_n^D, \quad (17)$$

ahol

$$A_n^S = \frac{N_n}{N_3} \quad \text{és} \quad A_n^D = \langle \cos(2\pi l Z_n) \rangle. \quad (18)$$

$A_n^S$  az ún. méretegyüttható és  $A_n^D$  a deformációs együttható.

Bertaut [11] nyomán  $A_n^S$ -ből megkaphatjuk a koherens krisztallitméretet,  $N_3$ -at a következő kifejezésből:

$$\frac{1}{N_3} = -\left(\frac{dA_n^S}{dn}\right)_{n=0}. \quad (19)$$

A Warren—Averbach-analízis döntő lépése a méret és deformációs együtthatók szétválasztása. Ehhez vegyük a (17) egyenlet mindkét oldalának a logaritmusát:

$$\ln A_n(l) = \ln A_n^S + \ln A_n^D(l). \quad (20)$$

Látható, hogy ha különböző rendű reflexiók azonos indexű Fourier-együtthatóit (20) szerint felírjuk, akkor az  $l$ -től való függés csak a második tagban jelenik meg.  $l$  és  $n$  kis értékei esetén ez a tag sorba fejthető és a következőket kapjuk

$$\ln A_n^D(l) \cong \ln(1 - 2\pi^2 l^2 \langle Z_n^2 \rangle) \cong -2\pi^2 l^2 \langle Z_n^2 \rangle, \quad (21)$$

továbbá

$$\ln A_n(l) = \ln A_n^S - 2\pi^2 l^2 \langle Z_n^2 \rangle. \quad (22)$$

Ez utóbbi egyenlet alapján kézenfekvő, hogy  $\ln A_n(l)$ -et ábrázolva  $l^2$  függvényében, az  $l=0$ -hoz extrapolált értékek megadják az  $A_n^S$  méretegyütthatókat. Ezzel a Fourier-együtthatóknak a méret és deformációs együtthatókra való szétválasztása elvben végrehajtható.

Warren és Averbach módszerével kapcsolatban két probléma vetődik fel. Az egyik az, hogy nehezen értelmezhető a  $\langle Z_n^2 \rangle$  átlagos rácsstorzulás egy adott diszlokáció modell alapján [5, 12, 13]. A másik problémára Gaál [14] mutatott rá. A (22) kifejezésnél ugyanis lényegesen kihasználtuk azt a feltevést, hogy a Fourier-együtthatók a reflexió rendjének analitikus függvényei. Ez a feltevés pedig általában nem teljesül.



#### 4. A vonalszélesedés Krivoglaz—Wilkens modellje

A diszlokációk okozta vonalszélesedésnek a diszlokációeloszlásból való közvetlen meghatározására az első próbálkozásokat *Krivoglaz* és *Rjabosapka* tették meg [6]. Ebben az elméletben egy teljesen véletlenszerű diszlokációeloszlásból kiindulva határozták meg a röntgen diffrakciós vonalszélességet. Egy korábbi szeminárium keretében már foglalkoztunk ennek az alapjaival [15].

A Krivoglaz—Rjabosapka-elmélet [6] alapján *Wilkens* és *munkatársai* [16, 17] megvizsgálták alakított Cu és NaCl egykristályok Bragg-reflexióinak kiszélesedését. Viszonylag jó egyezést találtak a más módszerekkel (TEM, maratás) meghatározott diszlokációsűrűségekkel. Ez az egyezés azonban a diszlokációk levágási rádiuszára túlságosan önkényes feltevéseket tett szükségessé.

*Wilkens* megmutatta, hogy az  $R_0$  levágási rádiuszra nem kell önkényes feltevéseket tenni, ha a teljesen véletlenszerű diszlokációeloszlás helyett egy, egyébként sokkal realisztikusabb, ún. korlátozottan véletlenszerű elrendezésből kiindulva számítjuk ki a vonalszélesedést [18, 19].

A következőkben röviden összefoglaljuk a Krivoglaz—Wilkens-elmélet leg-egyszerűbb eredményeit a teljességre való törekvés igénye nélkül [5].

A korlátozottan véletlenszerű diszlokáció elrendeződést a következő módon adhatjuk meg. Legyen egy  $F_0$  keresztmetszetű, henger alakú kristályban a henger tengelyével párhuzamosan  $N_0$  számú diszlokációvonal. Osszuk  $F_0$ -t  $p^2$  számú, azonos méretű területre. Jelöljük ezeket  $F_p$ -vel, akkor  $F_p = F_0/p^2$ . Minden egyes  $F_p$ -t messen azonos számú diszlokáció, amelyeknek a száma:  $N_p = N_0/p^2$ . Ugyanakkor egy-egy  $F_p$ -ben a diszlokációk eloszlása legyen véletlenszerű. A diszlokációeloszlás így két mennyiséggel jellemezhető, a  $q$  diszlokációsűrűséggel és az  $F_p$  keresztmetszetek sugarával,  $R_p$ -vel, melyekre:

$$q = \frac{N_0}{F_0} = \frac{N_p}{F_p} \quad \text{és} \quad R_p = \sqrt{\frac{F_p}{\pi}} = \frac{1}{p} \sqrt{\frac{F_0}{\pi}}. \quad (23)$$

Az alakított kristályban a diszlokációk rugalmas energiája a következő alakban írható [20]:

$$E = AVG b^2 q \ln \frac{R_e}{r_0}, \quad (24)$$

ahol  $V$  a kristály térfogata,  $G$  a nyírási modulusz,  $b$  a Burgers-vektor,  $r_0$  a belső levágási rádiusz és  $A$  a diszlokációk típusától függő konstans faktor. *Wilkens* megmutatta [19], hogy az előbb definiált, korlátozottan véletlenszerű diszlokációeloszlás esetén az  $R_p$  sugár azonos a (24) kifejezésben szereplő  $R_e$  külső leáryékolási rádiusszal.

Az ilyen diszlokációeloszlás okozta vonalszélesedés valós Fourier-együtthatói (l. a (7) kifejezést) a következő módon írhatók [21]:

$$A_n = \exp(-\bar{Q}(n)), \quad (25)$$

$$\bar{Q}_n = \frac{\pi}{2} g^2 b^2 \bar{c} \bar{q} f(\bar{\eta}), \quad (26)$$



ahol  $g$  a reflektáló hálózati síkok diffrakciós vektorának abszolút értéke,  $\bar{C}$  a diszlokáció elrendezéstől függő átlagos geometriai tényező. A  $\bar{C}$  mennyiség értéke a diszlokációrendszer alkotó csavar, él és vegyes komponensek arányától és elrendeződésétől függ, amelynek konkrét meghatározása túlmegy a jelen dolgozat keretein.  $\bar{\rho}$  egy átlagos diszlokációsűrűség, amelynek átlagolása hasonlóan végezhető el, mint  $\bar{C}$ -é.

Az  $f(\bar{\eta})$  függvényt Wilkens csavardiszlokációk esetén a következőképpen adta meg [19, 21]:

$$f(\eta) \cong -\ln \eta + \delta, \quad (27)$$

$$\eta = n \frac{\sigma}{2R_e} \exp(0,7 + \ln \mu), \quad (28)$$

ahol  $\sigma = |\sin \psi|$ ,  $\psi$  a Burgers-vektor és a diszlokációvonal által bezárt szög,  $\mu = (\mathbf{g} \cdot \mathbf{b})$  és  $\delta$  egynél kisebb szám.

A (26) kifejezésben szereplő  $f(\bar{\eta})$  a különböző típusú diszlokációkra történő átlagolásban különbözik (27)-től.

A Krivoglaz—Wilkens-elmélet alapvető kifejezései tehát a (25)—(28) egyenletek. Kis Fourier-indexek esetén  $A_n$  sorbafejthető  $n$  szerint és az így adódó kifejezés összevethető a kísérletileg meghatározható Fourier-együtthatókkal.

Meg kell jegyezni, hogy a vonalprofil analízis módszere még sok problémát rejt magában mind elméletileg, mind kísérletileg. Elméleti problémát jelent a diszlokációelrendeződés és a vonalszélesedés kapcsolatának a kísérleti eredmények szempontjából is alkalmazható felderítése. A kísérlet oldaláról a probléma nem új. Az ún. „fizikai” profil minél pontosabb meghatározása, különösen a csúcstól távolabbi szögtartományban, ahol a szórt intenzitás összemérhető a háttérszórással, nem csekély kísérleti nehézségeket okoz.

## 5. Vonaleltolódás

A mintára gyakorolt külső feszültség, a rétegződési hibák, valamint a diffraktométer nem tökéletes fókuszálásából adódó hibák mind vonaleltolódást okoznak. Egy adott Bragg-reflexióhoz tartozó  $a_{hkl}$  rácsparaméter ezeknek a hatásoknak a figyelembevételével a következő módon adható meg [4, 22]:

$$a_{hkl} = a_0 + a_0 \alpha G_{hkl} + a_0 \varepsilon_f J_{hkl} + a_0 (S_1)_{hkl} \sigma + m \cos \theta \operatorname{ctg} \theta, \quad (29)$$

ahol  $a_0$  a valódi rácsparaméter,  $\alpha$  az „intrinsic” és „extrinsic” rétegződési hiba sűrűségek különbsége,  $\varepsilon_f$  a rétegződési hibák okozta relatív rácsparaméter változás,  $\sigma$  a mintára gyakorolt külső húzófeszültség,  $G_{hkl}$  és  $J_{hkl}$  a reflexió rendjétől függő konstansok, amelyek geometriai megfontolásokból adódnak [4],  $(S_1)_{hkl}$  a rugalmas nyúlási tenzor a  $(hkl)$  síkokra vonatkoztatva, ami polikristályos anyagok esetén jó közelítéssel a következő:  $S_1 = -\nu/E$  ( $\nu$  a Poisson-szám és  $E$  a Young-modulusz). Végül  $m \cos \theta \operatorname{ctg} \theta$  a diffraktométer nem tökéletes fókuszálásából adódik, ahol  $m$  a minta síkjának a fókuszáló körtől való távolságától függ.

A (29) egyenletet Davies és Wagner [22] nyomán a következő módon alkalmazhatjuk a vizsgált minta feszültségállapotának a meghatározására. A mintát a diffrakciós mérés során „in situ” vessük alá külső terhelésnek. Különböző terhelések mellett



meghatározhatjuk az elvileg elérhető összes Bragg-csúcsot, ami egy fcc fém fel-tételezve mintegy 10 vonalat jelent. Az így kapott  $a_{hkl}$  értéket az (1) egyenletben szereplő öt ismeretlenhez a legkisebb négyzetek módszerével illeszthetjük.

Figyelemre méltó, hogy ezzel a módszerrel a szokásos feszültségdeformáció-görbe mellett meghatározhatunk egy  $\sigma_{rtg} - \varepsilon$  feszültségdeformáció-görbét, amelynek elvileg meg kell egyeznie a szokásos módon felvett feszültségdeformáció-görbével, ha a mintában, a felületi rétegét is beleértve, homogén feszültség állapot alakul ki. A  $\sigma_{rtg}$  a röntgensugárzás behatolási mélységével azonos vastagságú felületi réteg feszültségállapotát adja meg. Ennek, a szokásos  $\sigma - \varepsilon$  görbétől való eltérése, a felületi réteg feszültségállapota és a minta belsejében uralkodó feszültségállapotok közötti különbségeket adja meg.

#### IRODALOM

1. A. J. C. Wilson, Proc. Roy. Soc., A 180, 277, 1942.
2. B. E. Warren and B. L. Averbach, J. Appl. Phys. 21, 595, 1950; 23, 497, 1952.
3. B. E. Warren, Progr. Met. Phys. 8, 147, 1959.
4. C. N. J. Wagner, Local Atomic Arrangement Studied by X-ray Diffraction (ed. J. B. Cohen and J. E. Hilliard), Gordon and Breach, New York, 1966.
5. M. Wilkens, phys. stat. sol. (a) 2, 359, 1970.
6. M. A. Krivoglaz K. P. Rjabosapka, Fiz. Metallov i Metallovedenie, 15, 18, 1963.
7. H. Oettel, Exp. Techn. d. Physik, 21, 99, 1973.
8. I. S. Szántó and L. Varga, J. Appl. Cryst., 2, 72, 1969.
9. I. Neubauer and L. Varga, Acta Techn. Acad. Scient. Hung. 64, 287, 1969.
10. A. R. Stokes, Proc. Phys. Soc. Lond. 61, 382, 1948.
11. F. Bertaut, C. R. Acad. Sci., Paris 228, 187, 1949.
12. M. Wilkens, phys. stat. sol. 2, 692, 1962.
13. M. Wilkens and R. J. Hartmann, Z. Metallk. 54, 676, 1963.
14. Gádál István, Kandidátusi disszertáció, MTA, 1975.
15. Ungár Tamás, Termikusan aktivált diszlokáció mozgással kapcsolatos jelenségek, Szemináriumi jegyzet (szerk. Kovács István, ELTE, Budapest, 1976).
16. M. Wilkens and M. O. Bargouth, Acta Met. 16, 465, 1978.
17. K. H. Matucha, W. Franzbecker and M. Wilkens, phys. stat. sol. 33, 493, 1969.
18. M. Wilkens, Acta Met. 15, 1412, 1967.
19. M. Wilkens, Acta Met. 17, 1155, 1969.
20. Kovács István és Zsoldos Lehel: Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
21. M. Wilkens, Proc. Conf. Fundamental Aspects of Dislocation Theory, National Bureau of Standards, Washington, 1969.
22. H. A. Davis and C. N. J. Wagner, J. Materials Sci. 7, 105, 1972.



# A KÉPLÉKENY ALAKÍTÁS VIZSGÁLATI MÓDSZEREI

## 8. A KEMÉNYSÉGMÉRÉS

JUHÁSZ ANDRÁS

ELTE, Általános Fizika Tanszék

### TARTALOM

1. Bevezetés .....	93
2. A szűrőkeménység meghatározása .....	94
3. A Vickers-féle keménységmérés .....	95
4. A mikrokeménység-mérés .....	96
4.1 A mikrokeménység terhelésfüggése .....	97
4.2. A mikrokeménység függése a terhelési sebességtől és a terhelés idejétől .....	99
5. A felület előkészítése .....	100
6. A keménységnyom nagyságának meghatározása fémmikroszkóppal .....	100
7. A mikrokeménység-mérés alkalmazási területei a fémfizikában .....	100
7.1. Átlagos mechanikai tulajdonságok meghatározása .....	100
7.2. Mikroszerkezeti tulajdonságok meghatározása keménységméréssel .....	101
8. Magas hőmérsékleti keménységmérés .....	102
9. Irodalom .....	103

### 1. Bevezetés

A kristályos anyagok mechanikai tulajdonságainak jellemzésére használt paraméterek közül az egyik legelterjedtebb az ún. „keménység”. A keménység az anyag ellenállását fejezi ki valamilyen, a mérések összehasonlíthatósága céljából szabványosított, deformáló hatással szemben. Az első mérési eljárást az egyes ásványok keménységének jellemzésére mintegy 150 évvel ezelőtt dolgozták ki. Ez az ún. Mohs-féle keménység tíz önkényesen választott ásvány (talkum, gipsz, kalcit, fluorit, apatit, földpát, kvarc, topáz, korund, gyémánt) keménységéhez viszonyítva jellemzi a vizsgált anyagot. Az összehasonlítás alapjául kiválasztott tíz ásvány keménysége a felsorolás sorrendjében nő. Ha a sorból kiválasztunk egy ásványt, az az öt megelőzőeket karcolja, viszont azokkal nem karcolható, keménysége tehát ezeknél nagyobb. A sor következő tagjai karcolják a kiválasztott anyagunkat, viszont azzal nem karcolhatók, így ezeknél a választott anyag keménysége kisebb. A Mohs-féle keménységmeghatározás során megadjuk, hogy a tíz ásvány sorába hová lehetne besorolni a vizsgált anyagot. A Mohs-féle karcolási keménység kvalitatív összehasonlításokra alkalmas.

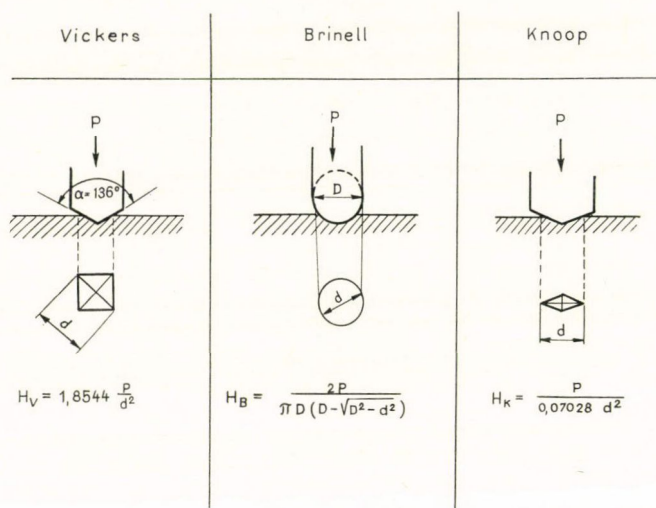
A mai, kvantitatív összehasonlításokra is alkalmas keménységmérési eljárások két nagy csoportba, a karcolási és a szűrővizsgálatok csoportjába sorolhatók. A karcolási vizsgálatok során egy ismert nagyságú erővel a próba felületébe nyomott acél- vagy gyémántékkal megkarcolják az anyagot, majd a kapott karc vastagságát mérik. A szűrő keménységvizsgálatok esetén szabályos geometriai alakú mérőfejet állandó, ismert nagyságú erővel (terheléssel), nyomnak be a vizsgált minta felületébe.



A mérőfej plasztikusan deformálja az anyagot és jellegzetes lenyomatot hagy a felületben. A vizsgálatok során a lenyomat méreteit határozzák meg és ebből következtetnek az anyag keménységére. A fémfizikában és az anyagvizsgálatban szinte kizárólag a szűrő keménységmérést alkalmazzák, ezért a továbbiakban ezek elméletével és gyakorlati alkalmazásaival foglalkozunk részletesen.

## 2. A szűrőkeménység meghatározása

A szűrő keménységvizsgálatok esetén gyémántból vagy acélból készült szabályos geometriai alakú mérőfejet préselnek az anyag felületébe. A legerjedtebb szabványosított mérőfejeket és a benyomódásuk után a felületen visszamaradt nyomot az 1. ábra tünteti fel. Ha a vizsgált anyag keménysége nagy, azaz nagy az



1. ábra. A legerjedtebb mérőfejek és a benyomódásuk után, a vizsgált anyag felületén visszamaradt lenyomat

ellenállása a plasztikus alakváltozással szemben, úgy a lenyomat mérete kicsi. Ha az anyag keménysége, ellenállása kisebb, a lenyomat ennek megfelelően nagyobb lesz. A keménységet, mint a mérőfejre ható erő (terhelés,  $P$ ), és a mintában keletkezett lenyomat felületének ( $A$ ) hányadosát definiálták. A keménység jelölésére az irodalomban a „H” betűt használják.

Így:

$$H = \frac{P}{A} \left( \frac{\text{kp}}{\text{mm}^2} \right). \quad (1)$$

A mérés során az ismert  $P$  terhelés hatására keletkezett lenyomat olyan karakterisztikus méreteit határozzák meg, amely alapján, a mérőfej geometriai adatait felhasználva, a benyomat felülete számítható. A különböző szabványosított szűrő

keménységvizsgálatok esetén a benyomat karakterisztikus, méréssel meghatározandó adatait és a keménység ezekkel kifejezett értékét az 1. ábra tünteti fel.

A szűrő keménységvizsgálatok közül a fémfizikai gyakorlatban leginkább a Vickers-féle módszer terjedt el, ezért a továbbiakban ennek tárgyalására szorítkozunk.

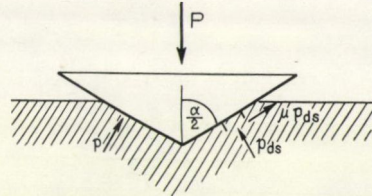
### 3. A Vickers-féle keménységmérés

A Vickers-féle keménységmérés esetén a mérőfej tetragonális gyémántpiramis, amely jellegzetes négyzet alakú lenyomatokat hagy az anyagban (1. ábra). A lenyomat átlója egyszerűen mérhető és ebből a gyémántpiramis geometriai adatait felhasználva a benyomat mélysége, felülete meghatározható. Így az anyag Vickers-keményiségére (1) felhasználásával adódó kifejezés:

$$H_v = \frac{P}{A} = \frac{P}{\frac{d^2}{2 \sin \frac{\alpha}{2}}} = \frac{P \cdot 2 \cdot \sin 68^\circ}{d^2} = 1,8544 \frac{P}{d^2}. \quad (2)$$

A mérőfej benyomódása során a vizsgált minta részben rugalmasan, részben plasztikusan deformálódik. A megterhelt mérőfej hatására először egy rugalmas deformációs zóna alakul ki az anyagban, majd a nyomás növekedésével megindul a plasztikus alakváltozás. A Vickers-piramis okozta képlékeny deformáció bonyolult több tengelyű alakváltozás.

A gyémántgúla egyenletes sebességű benyomódásakor az anyagban kialakuló deformációs feszültségeket Tabor [2] nyomán értelmezhetjük. A mérőfejre ható  $P$  terheléssel a vizsgált anyag belső feszültsége tart egyensúlyt. A piramis oldallapjainak  $dA$  felületelemére  $p \cdot dA$  normális irányú és  $\mu p dA$ , súrlódásból származó, érintőirányú erővel hat a deformálódó anyag. Ezen erők függőleges irányú komponensei tartanak egyensúlyt a külső terheléssel (2. ábra), azaz



2. ábra. A Vickers-mérőfejre ható erők a gúla egyenletes sebességű benyomódása esetén

$$P = \int \left( p \cdot \sin \frac{\alpha}{2} + \mu p \cdot \cos \frac{\alpha}{2} \right) dA. \quad (3)$$

Kísérleti tapasztalat, hogy a Vickers-piramis által keltett plasztikus alakváltozást a belső feszültségek nyírókomponensei eredményezik. A maradandó deformáció során a nyírófeszültségek hatására tömegesen keletkeznek és mozdulnak el a diszlokációk. A kristály különböző csúszási rendszereiben mozgó, egyre növekvő számú diszlokáció kölcsönhatása egymással, a szemcsehatásokkal, precipitációkkal, oldott szennyezőatomokkal egyre növeli az anyag belső ellenállását és határt szab a mérőfej benyomódásának. A benyomat környezetében lokálisan felkeményedett plasztikus deformációs zóna megközelítően félgömb alakú, sugara a kísérleti tapasztalatok szerint legtöbbször kb. 10–15-szöröse a nyom mélységének.



A keménység és az anyagra jellemző egyéb mechanikai paraméterek, mint például a  $\sigma_f$  folyásfeszültség, vagy a  $\sigma_{sz}$  szakítószilárdság közötti kapcsolatra számos félempirikus összefüggés ismert [2, 3, 4]. Általánosan elfogadott, hogy a fémek többségénél, ahol az alakítási keményedés számottevő, a  $\sigma_{sz}$  szakítószilárdság és a  $H_v$  keménység között

$$\frac{H_v}{\sigma_{sz}} \approx 3 \quad (4)$$

egyszerű kapcsolat áll fenn [4]. Az alakítási keményedést nem mutató fémek esetén a keménység a folyási feszültséggel arányos. Davis [5] alakítási keményedést nem mutató amorf szerkezetű, ún. üvegfémeken vizsgálta a keménység és a folyásfeszültség kapcsolatát. Mérései szerint

$$H_v \cong 3,2\sigma_{fsz}.$$

Érdemes megemlíteni, hogy a Vickers-piramis lenyomatának alakja különböző torzulásokat mutat erős alakítási keményedést mutató, illetve nem keményedő fémek esetén (3. ábra). A benyomatok jellegzetes torzulása kvalitatív módon, a deformációs folyamat mechanizmusa alapján értelmezhető. A fémfelületbe nyomódó Vickers-piramis hegye olyan képlékeny alakváltozást indít meg, amely során az anyag, a feszültségtér nyírókomponenseinek hatására kitér a gyémántgúla útjából. Izotrop anyagoknál ez legkönnyebben a piramis-lapok közepe mentén a minta szabad felszíne felé történhet.



3. ábra. A keménységnyom jellegzetes torzulásai:

- a) nagy alakítási keményedést mutató anyag,
- b) lágy, nem keményedő anyag esetén

Az erős alakítási keményedést mutató fémek esetén a mérőfej lapjai mentén meginduló deformáció hamar megszűnik. A továbbiakban a vizsgált anyagnak ez a felkeményedett része a mérőfejhez hasonló merevségűnek mutatkozik és szinte a gyémántfejjel együtt nyomódik be tovább az anyagba. A lenyomat környezetének ez a besüllyedése eredményezi a nyom 3a. ábrán bemutatott torzulását. A kis alakítási keményedést mutató fémek esetén a Vickers-piramis lapjai mentén majdnem akadálytalanul elcsúszó anyag a nyom közvetlen környezetében feltorlódik. Ez okozza a 3b. ábrán bemutatott nyomtorzulást.

#### 4. A mikrokeménység-mérés

A keménységmérés lehetővé teszi kristályos testek mechanikai tulajdonságainak roncsolás nélküli vizsgálatát. A makroszkopikus anyagvizsgálatban jól bevált módszert olyan speciális problémák megoldására is alkalmazni kívánták, mint például apró alkatrészek, galvanikus úton felvitt fémbevonatok, különleges eljárásokkal



kopásállóvá tett élek, tűhegyek vizsgálata. Így fejlődött ki az 1930-as években az ún. „mikrokeménység-mérés”. A mai szakirodalom a mikrokeménység-mérés fogalmán olyan szűrőkeménység vizsgálatot ért, amelynél a mérőfejből származó benyomat átmérője ( $d$ ) kisebb mint  $50\text{ }\mu\text{m}$ . Ez általában a benyomófej 5—200 pond terhelése esetén áll fenn. A kis nyomátmérő pontos meghatározására a keménység-mérő berendezést mikrométerrel felszerelt mikroszkóppal építik össze.

A keménységmérés bevezetése a mikroszkopikus mérettartományban egyrészt kiterjesztette a módszer alkalmazási körét az anyag vizsgálatán túl az alap-kutatás, a fémfizika, félvezetőfizika területeire is, másrészt azonban sajátos mérés-technikai problémákat vetett fel. A mikrokeménység értékek hitelessége, megbízhatósága döntően függ attól, hogy mennyire veszik figyelembe ezeket a sajátos hibaforrásokat.

A mikrokeménység mérésnél jelentkező sajátos problémákat a következőkben adhatjuk meg:

- a) A mikrokeménység értéke függ:
  - a mérésnél alkalmazott terheléstől,
  - a terhelés idejétől és sebességétől,
  - a vizsgált felület megfelelő előkészítésétől.
- b) A hiteles keménységértékek meghatározásakor nem szabad figyelmen kívül hagyni az anyag mikroszerkezeti adottságait, pl. szemcseméretét; galvanizált rétegek, vékony fóliák esetén a rétegvastagságot.
- c) A mérési eredmények hibájának megállapításakor tekintetbe kell venni a mikroszkóp objektív-mikrométerének leolvasási hibáját is.

#### 4.1. A mikrokeménység terhelésfüggése

A Vickers-keménységet definiáló (2) egyenlet nem veszi figyelembe, hogy a lenyomat átmérője rendszerint igen bonyolult függvénye a terhelésnek. A kísérleti eredményeket első közelítésben az ún. Meyer-féle hatványtörvénnyel írhatjuk le. E szerint:

$$P = \text{const. } d^n, \quad (5)$$

ahol  $n$  értéke kismértékben még függ a terheléstől. A mérési eredmények szerint  $n$  terhelésfüggése a homogén anyagoknál elhanyagolható és értéke jó közelítéssel anyagra jellemző állandónak adódik. A kísérletileg meghatározott  $n$  értékek az anyag alakítási keményedésétől függően 1 és 2 közé esnek. Erős alakítási keményedés esetén  $n \approx 2$  adódik [2].

A Meyer-féle (5) hatványfüggvényt és a keménység (2) definíciós egyenletét felhasználva a keménység terhelés függésére

$$H_v = \text{const. } P^{\frac{n-2}{n}} \quad (6)$$

összefüggést kapjuk. A kísérleti tapasztalatok szerint nagy  $P$  értékek esetén ( $P > 300$  pond) az alakítási keményedés nagy,  $n \approx 2$ , így  $H_v$  független a terheléstől. A nagy terhelésekkel ( $P \approx 0,3\text{—}10$  kp) dolgozó makroszkopikus mérési eljárásnál tehát a keménységérték terheléstől független objektív anyagállandónak fogadható el. A mikrokeménység-mérés tartományában  $n \neq 2$ , a keménység nő a terhelés csökkenésével. A mikrokeménység méréssel kapott adatok tehát csak a mérésnél alkalmazott terhelés feltüntetése mellett tekinthetők a vizsgált anyagra jellemző paraméterek [8].



A szabványosított Vickers-mikrokeménység terhelésfüggése még az egyfázisú anyagok esetén is gyakran megnehezíti a különböző eredmények összehasonlítását, értelmezését. Ezért napjainkban is folynak próbálkozások, hogy olyan mikrokeménységmérő eljárásokat dolgozzanak ki, amelyek eredménye a terheléstől függetlenül csak a vizsgált anyagra jellemző. *Fröhlich és munkatársai* [6] olyan anyagvizsgáló berendezésre szereltek fel Vickers-piramist, amely, miközben egyenletes lassú sebességgel belenyomja a gyémánt gúlát a vizsgálandó anyagba, automatikusan kirajzolja a deformációra jellemző terhelés ( $P$ ) és benyomatmélység ( $h$ ) közötti összefüggést. A legkülönbözőbb anyagokra kapott kísérleti eredmények alapján úgy találták, hogy

$$P = P(h)$$

függvénykapcsolat a

$$P = a_1 h + a_2 h^2$$

hatványsorral jól közelíthető. A kifejezésben szereplő  $a_1$  és  $a_2$  mennyiségek a terhelés-benyomatmélység görbe analízisével nyerhető állandók. Az  $a_1$  és  $a_2$  állandók értéke a minta képlékeny alakíthatóságára jellemző, fizikai tartalma tehát a keménységnek megfelelő.

A hagyományos mikrokeménység érték terhelésfüggése mellett, a mért adatok hibája is függ az alkalmazott terheléstől. A mérések terheléstől származó relatív hibáját az (1) összefüggés  $P$  szerinti differenciálásával kaphatjuk meg. E szerint

$$\frac{\partial H}{\partial P} = \frac{1}{A} = \frac{H}{P},$$

ahonnan a mérés relatív hibájára

$$\frac{\delta H}{H} = \frac{\delta P}{P}$$

adódik. A mikrokeménység-értékek relatív hibája tehát egyenes arányban változik a terhelés meghatározásának relatív pontosságával. Így, ha a terhelés hibáját a mérőberendezést jellemző állandónak feltételezzük, a keménységmérés relatív hibája lineárisan növekszik az alkalmazott terhelés csökkenésével.

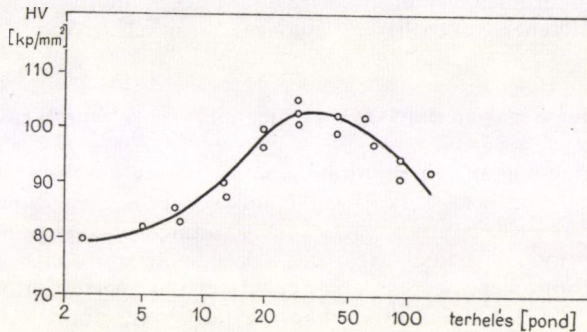
A mérésnél alkalmazott optimális terhelés megválasztásakor a fentiek figyelembevétele mellett a mérendő anyag sajátosságaira is tekintettel kell lenni.

Vékony fóliák, galvanizált rétegek vizsgálata során a terhelés megválasztásával alkalmazkodni kell a mérendő fólia rétegvastagságához. A méréshez nem használható nagyobb terhelés, mint amely a rétegvastagság 0,1-ének megfelelő mélységű benyomatokat hoz létre. A mérésnél ugyanis, mint már korábban tárgyaltuk, a képlékeny alakváltozás tartománya nem korlátozódik kizárólag a benyomat térfogatára, hanem annak többszöröse. Így, ha a terhelést túl nagyra választjuk, úgy a mérőfej benyomódásakor nem csupán a mérendő fólia, hanem az alátétanyag is deformálódik, a mérés eredménye tehát már nemcsak a vizsgálandó réteg mechanikai tulajdonságait jellemzi.

Szerkezeti inhomogenitásokat tartalmazó minták keménysége különösen szembetűnő terhelésfüggést mutat. Az ilyen anyagok esetében az (5), (6) összefüggésekben szereplő „ $n$ ” Meyer-kitevő értéke, ami homogén anyagoknál állandónak adódik, változik a terheléssel. A jelenségre az anyag mikroszerkezeti sajátosságai adnak magyarázatot. A 4. ábra  $\text{Cu}_3\text{Ti}$  kiválásokat tartalmazó réz—titán ötvözet mikrokeménységét tünteti fel a 2,5—130 pondig változó terhelés függvényében [7].



Kis terheléseknél a mérőfej által deformált tartomány kicsi, az anyag plasztikus viselkedése, keményedése a réz-kristályra jellemző. A terhelés növelésével a Vickers-piramis által deformált tartományba egyre gyakrabban esnek bele  $\text{Cu}_3\text{Ti}$  kiválások is. Ezek lokálisan akadályozzák a plasztikus deformációt és keményítik az anyagot. Nagy terhelések esetén a deformált térfogat egyre jobban meghaladja az ötvözet mikroszerkezeti elemeinek méretét, ezért a kiválások helyi keményítő hatása kevésbé érződik, a keménységértékek csökkennek, az anyag ún. „kvázihomogén” viselkedést mutat.



4. ábra.  $\text{Cu}_3\text{Ti}$  kiválásokat tartalmazó réz—titan ötvözet mikrokeménysége a változó terhelés függvényében [7]

Az elmondottak értelmében tehát arra következtethetünk, hogy az  $n$  Meyer-kitevő értékét a plasztikus alakváltozást akadályozó keményedési mechanizmus szabja meg. A nagy terhelések tartományában, ahol az anyagok kvázihomogén viselkedést mutatnak,  $n$  állandóvá válik, értéke megközelítőleg 2.

#### 4.2. A mikrokeménység függése a terhelési sebességtől és a terhelés idejétől

A tapasztalatok szerint a keménységnyom mérete függ a mérőfej benyomódási sebességétől. Ha a deformáció túl lassú, úgy különösen jól alakítható anyagoknál, a lenyomat mérete megnő. A jelenséget részben a benyomódás hosszú ideje alatt meginduló kúszás, részben a berendezés rezgései okozzák. Ezek a rezgések jóformán regisztrálhatatlanok és kiküszöbölhetetlenek, energiájuk segíti az anyag képlékeny deformációját. Ha a deformáció sebességét növeljük, a nyomátmérő egyre csökken és az anyag látszólag egyre keményebbnek adódik. A terhelési sebesség optimális értékének, 20 pond-nál nagyobb terhelések esetén, kb. 1 mm/perc felel meg [8].

A vizsgált minta képlékeny alakváltozása döntően a mérőfej megterhelésekor következik be, de lassan tovább folytatódik, ha a megterhelt piramist hosszú ideig pihentetjük a mintán. A jelenség magyarázatát a lassú terhelési sebességek káros következményei közt már említett kúszás és a rezgések okozta többletdeformáció adják meg. A mérések összehasonlíthatósága szempontjából a terhelés idejét szabványban rögzítették. E szerint a mikrokeménységmérő berendezéseket úgy kell beállítani, hogy a mérőfej a teljes terhelés után még kb. 15–20 másodpercig pihenjen a mintán. Ha valamely mérésnél ettől eltérnek, azt az eredmények mellett külön fel kell tüntetni [8].



### 5. A felület előkészítése

A mikrokeménység mérés során figyelmet kell fordítani a minta felületének előkészítésére. A nyomátmérő pontos, hiteles megállapítása csak sík, a Vickers-piramis magasságvonalára merőleges felület esetén lehetséges. A mérendő felületeket tehát a mérés előtt gondosan meg kell munkálni, csiszolni, polírozni. A megmunkálás során a minta felületi rétege erősen deformálódik és felkeményedik. Az ilyen felkeményedett felületeken végzett mérések hibája 100%-os is lehet, ezért ezt a réteget a mérés előtt finoman el kell távolítani. Erre a különösen finom mechanikai polírozás, vagy a minta felületének elektrolitikus leoldása, az ún. elektropolírozás alkalmas.

### 6. A keménységnyom nagyságának meghatározása fémmikroszkóppal

A mikrokeménység-mérésnél adódó lenyomatok átmérője néhány mikrontól 50—100 mikronig terjedhet. A kapott keménység értékének hibája erősen függ a nyomátmérő mérésének pontosságától. A nyomátmérő mérési pontosságát részben a mikroszkóp felbontóképessége, részben a mikrométer hibája határozza meg. A mikroszkóp felbontóképessége az objektív numerikus apertúrájától függ. A mikrokeménységmérőkhöz csatlakozó mikroszkópok numerikus apertúrája 0,2—0,6 közé esik, nagyításuk 200—500-szoros. Ilyen paraméterek mellett a keménységnyom átmérőjének leolvasási hibakorlátja 0,5—1  $\mu$ . A mikrokeménység értékének a mikroszkóp leolvasási pontatlanságából adódó hibáját a (2) összefüggés alapján  $d$  szerinti differenciálással kaphatjuk meg:

$$\frac{\partial H_v}{\partial d} = -2 \cdot 1,8544 \cdot P \cdot d^{-3} = 2H_v d^{-1},$$

azaz

$$\frac{\delta H_v}{H_v} = \frac{2\delta d}{d}.$$

A keménységadatok relatív hibája tehát kétszerese a nyomátmérő relatív hibájának. A lenyomat méretének növekedésével a keménységértékek hibája csökken.

### 7. A mikrokeménység-mérés alkalmazási területei a fémfizikában

A mikrokeménység-mérés a terhelés nagyságától és a mérés körülményeitől függően alkalmas mind az anyag egészére jellemző, átlagos mechanikai tulajdonságok vizsgálatára, mind arra, hogy a deformáció lokális voltát kihasználva az anyag mikroszerkezetére adjon információkat.

#### 7.1. Átlagos mechanikai tulajdonságok meghatározása

Az anyagvizsgálatban a termékek, féltermékek minősítése során az anyag átlagos mechanikai tulajdonságainak meghatározása a cél. Ilyen esetekben a méréshez olyan nagy terheléseket alkalmaznak, hogy a benyomódással deformált tartomány



nagysága mellett a próba mikroszerkezeti elemeinek (szemcsék, diszperz kiválások) mérete elhanyagolhatóvá válik. Így a mikrotartományok lokális keményítő hatása kiátlagolódik, az anyag kvázihomogén viselkedést mutat. Az így kapott keménység-adatok jól tükrözik a fém átlagos mechanikai tulajdonságait, értékükből becslést lehet adni a folyásfeszültség és a szakítószilárdság nagyságára is.

A fémekben hőkezelés hatására bekövetkező szerkezeti változások, mint amilyen a megújulás, rekrisztallizáció, fázisátalakulások, az anyag átlagos mechanikai tulajdonságainak megváltozását eredményezik. A mikrokeménység-mérés alkalmas az ilyen szerkezeti átalakulások időbeli lefutásának (kinetikájának), hőmérséklet-függésének stb. tanulmányozására [12].

### *7.2. Mikroszerkezeti tulajdonságok meghatározása keménységméréssel*

A kis terhelésekkel végzett mikrokeménység mérések a vizsgált anyag egy-egy kis tartományára helyileg jellemző mechanikai tulajdonságokat tükrözik. A lokális mechanikai tulajdonságokat tükröző keménységadatok az anyag mikroszerkezetével hozhatók kapcsolatba. A továbbiakban a mikrokeménység-mérés néhány ilyen jellegű felhasználását ismertetjük.

A többfázisú ötvözetek metallográfiai vizsgálatában, az egyes elkülönülő fázisok azonosítására az egyik legelterjedtebb módszer a mikrokeménység-mérés. Megfelelő kis terheléseket használva a mikroszkóp alatt jól megkülönböztethető fázisok keménysége külön-külön meghatározható. A kristályos testek képlékeny tulajdonságait, így a keménységet is, elsősorban a kémiai összetétel és a kristályszerkezet határozza meg, így a mikrokeménység értéke az egyes kristályos fázisokra jellemző. A mért keménységértékeket standard táblázatok [9, 10, 11] keménység-értékeivel összehasonlítva az egyes fázisok azonosíthatók.

A kohászati anyagvizsgálatban a karbonizálás, nitridizálás révén történő felületi keményítés ellenőrzése mikrokeménység-méréssel történik.

A fokozatosan változó terhelésekkel mért mikrokeménység felhasználható finom diszperz eloszlású inhomogenitásokat tartalmazó ötvözetekben az inhomogenitások nagyságának meghatározására és fóliák, galvanizált rétegek vastagságának mérésére is [12]. Ilyen esetekben a mérésnél alkalmazott terhelés fokozatos növelésével a benyomódással deformált tartományt egyre növelik. A kapott keménység-adatok alapján jól meghatározható, hol vált összemérhetővé a nyom átmérője a szerkezet inhomogenitását jellemző mérettel.

A mikrokeménység-mérés diffúziós folyamatok vizsgálatára is alkalmazható, ha a diffúzió az anyagban keménységgradiens létrejöttét eredményezi. Különösen alkalmas a mikrokeménység-mérés mikroszerkezetileg lokalizált diffúziós folyamatok, pl. kiválások feloldódásának tanulmányozására [13].

A mikrokeménységnyom környezetében gyakran figyelhető meg csúszásvonalrendszer, mechanikus ikerképződés. A mérés során a gyémánt-gúla diszlokációkat kelt és mozgat a kristályban. A lenyomat környezetében a diszlokáció-rendszer egyes anyagoknál maratási idomokkal láthatóvá tehető. Az elmondottak alapján adott orientációjú egykristályokon végzett mikrokeménység-mérés a képlékeny alakváltozás diszlokációs mechanizmusának kutatásában is felhasználható [7].



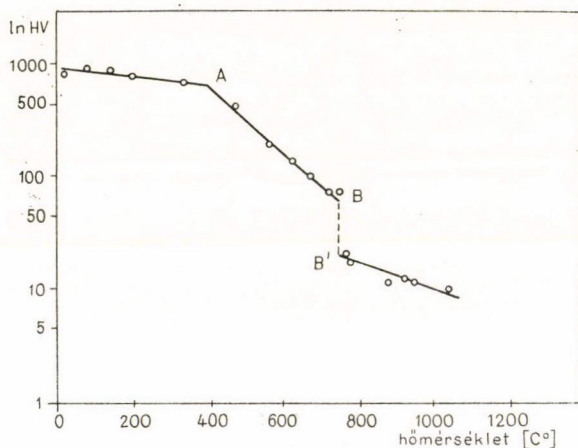
### 8. Magas hőmérsékleti keménységmérés

A fémek és ötvözetek mechanikai tulajdonságai lényegesen megváltoznak a hőmérséklet növekedésével. A magas hőmérsékleti szilárdság és tartósfolyás vizsgálatok sajátos kiegészítője a magas hőmérsékleti keménységmérés. A magas hőmérsékleten végzett keménységmérések jóval egyszerűbben elvégezhetők és kevésbé anyagigényesek, mint a kúszás- vagy szakítóvizsgálatok [14].

Magas hőmérsékleteken,  $T > T_{olv}/2$  a képlékeny alakváltozást a deformáló feszültségen kívül termikus hatások is segítik. A Vickers-piramis lenyomata alapján számított keménységértékek, a diszlokációmozgás termikus aktiválásának megfelelően exponenciálisan csökkennek a növekvő hőmérséklettel. A keménység hőmérsékletfüggését a

$$H_v = H_0 e^{-\frac{Q}{kT}} \quad (7)$$

összefüggés írja le [15, 16], ahol  $H_0$  az anyagi minőség és terhelés által meghatározott állandó (a keménység 0 K hőmérsékleten),  $Q$  a folyamat aktiválási energiája,  $k$  a Boltzmann-állandó és  $T$  a minta hőmérséklete.



5. ábra. Különböző hőmérsékleteken kapott keménységadatok tiszta mangán esetén [17]

Az 5. ábra tiszta mangánon különböző hőmérsékleteken végzett keménységértékek logaritmusát tünteti fel a hőmérséklet függvényében. A grafikon töréspontokkal megosztott egyenes szakaszokból áll. Az egyes szakaszok meredekségéből meghatározható a (7)-ben szereplő  $Q$  aktiválási energia. Az  $A$ -val jelölt töréspont azt jelzi, hogy a  $T \approx 400^\circ\text{C}$  fölött a folyamat aktiválási energiája, azaz a deformáció mechanizmusa megváltozott. A  $B$  és  $B'$  pontok között a grafikonnak szakadási helye van, ami a mangán  $\alpha$ - $\beta$  fázisátalakulásának következménye [17].

A magas hőmérsékleteken mért keménység a termikusan aktivált kúszási folyamatok miatt erősen függ a terhelés idejétől [18]. Állandó hőmérsékleten a ke-

ménység hatványfüggvény szerint csökken a terhelés  $t$  idejével:

$$H_v = H_1 \cdot t^{-n},$$

ahol  $H_1$  a magas hőmérsékleten egységnyi terhelési idővel mért keménység és  $n$  állandó.  $H_1$  és  $n$  értéke az anyagi minőségtől és a mérési hőmérséklettől függ.

A magas hőmérsékleti keménységmérés a kúszás- és szilárdságvizsgálatokhoz hasonló értékes információkat ad a fémek, ötvözetek mechanikai viselkedéséről. Ezenkívül azonban a módszernek még sok alkalmazási lehetősége van, segítségével „in situ” követhetők például a fázisátalakulások, diffúziós folyamatok, az újra kristályosodás stb. [14].

#### IRODALOM

1. Lendvay Ödön, Fizikai Szemle, 19, 65, 1969.
2. D. Tabor: The Hardness of Metals, Clarendon Press, Oxford, 1951.
3. R. Hill: The Mathematical Theory of Plasticity, Oxford University Press, London, 1967.
4. M. W. Mott: Micro-Indentation Hardness Testing, Butterworths, London, 1956.
5. L. A. Davis, Scr. Met. 9, 413, 1975.
6. F. Fröhlich, P. Grau, W. Grellmann, Phys. stat. sol. (a) 42, 79, 1977.
7. H. Bückle: Mikrohärteprüfung und ihre Anwendungen, Berliner Union, Stuttgart, 1965.
8. Fémek, ötvözetek, szilárdsági vizsgálatok, Vickers szerinti mikrokeménység mérése, Magyar Népköztársaság Országos Szabvány, MSz 105/8—65. 1966.
9. H. Bückle, Met. Rev. 4.
10. H. Bückle, VDI. Berichte, 41, 171, 1961.
11. G. V. Samsonov: Handbooks of High Temperature Materials, Properties Index, Plenum Press, New York, 1964.
12. H. Freund: Handbuch der Mikroskopie in der Technik, Umschau Verlag, Frankfurt am Main, 1969.
13. H. Bückle, Z. Metallkde, 34, 130, 1942.
14. M. G. Lonzinskij: High Temperature Metallography, Pergamon Press, Oxford, 1961.
15. E. R. Petty: Metallurgia, 56, 231, 1957.
16. J. H. Westbrook: Trans, ASM. 45, 221, 1953.
17. V. Griffiths, H. O. Neill, J. Inst. Met. 85, 105, 1956—57.
18. J. Engl, G. Heidtkomp, Z. Physik, 95, 30, 1935.





# A KÉPLÉKENY ALAKÍTÁS VIZSGÁLATI MÓDSZEREI

## 9. A FÁRASZTÁS

HONYEK GYULA

ELTE, Általános Fizika Tanszék

### TARTALOM

1. Bevezetés .....	105
2. Fogalmak és jelölések .....	105
3. A vizsgálati eredmények kiértékelése .....	108
4. A fárasztáskor fellépő mikroszerkezeti jelenségek .....	112
5. A kifáradást befolyásoló egyéb tényezők .....	113
6. Irodalom .....	116

### 1. Bevezetés

Fémek és ötvözetek mechanikai, szilárdsági vizsgálatának egyike a fárasztóvizsgálat. A fárasztási igénybevétel periodikus terheléssel történik. Leggyakrabban a fárasztás egyszerű alakú sima, vagy bemetszett próbatestekkel végzett húzó-nyomó (tengelyirányban igénybe vett próbatesttel), hajlító vagy csavaró fárasztó vizsgálatot jelent.

A szerkezeti elemekben az ismételt, váltakozó igénybevételek vagy alakváltozások hatására károsodási folyamat jön létre, amely a fémek és ötvözetek élettartamának csökkenéséhez, repedések keletkezéséhez, majd töréshez vezet. Ilyenkor a fellépő feszültségek kisebbek a sztatikus folyáshatárnál, a szerkezeti elemek képlékenységtől függetlenül, jelentősebb alakváltozás nélkül megrepednek, illetve elszakadnak. Ezt a jelenséget kifáradásnak nevezzük.

A fárasztóvizsgálat célja olyan adatok megállapítása, amelyek jellemzik a vizsgált anyag (próbatest, szerkezet) viselkedését ismételt igénybevételek hatására. Ennek alapján két vizsgálati típus különböztethető meg:

- a) Teljes kifáradási görbe (görbesereg) felvétele új, kifáradás szempontjából ismeretlen anyagok vizsgálatánál.
- b) Összehasonlító fárasztóvizsgálat annak megállapítására, hogy különböző technológiai, konstrukciós, ötvözési stb. változat közül melyik a legmegfelelőbb.

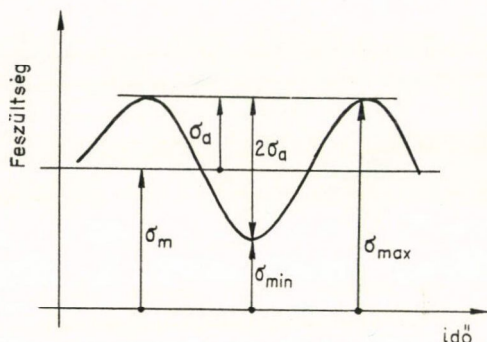
### 2. Fogalmak és jelölések

A fárasztó igénybevétel lehet egyszerű (húzó-nyomó, hajlító vagy csavaró), illetve egyszerű igénybevételek kombinációja. A próbatestben keletkező tengelyirányú, illetve tangenciális feszültségek időbeli lefolyása az igénybevétel jellegétől függetlenül, általában megközelítően szinusz alakú. Ilyen feszültség-idő függvény látható az 1. ábrán, ahol a megfelelő jelöléseket is feltüntettük. Az 1. ábráról leol-



vasható jelöléseken kívül megemlítjük még, hogy a terhelésméltlódések számát  $n$ -nel, frekvenciáját  $f$ -fel jelöljük. A  $K_t$  alaktényező a bemetszés geometriai alakjától függő tényező, amely a bemetszés okozta legnagyobb feszültség és az átlagos feszültség hányadosa. Az  $R_S$  feszültségarány a legkisebb és a legnagyobb feszültség hányadosa, vagyis

$$R_S = \frac{\sigma_{\min}}{\sigma_{\max}}.$$

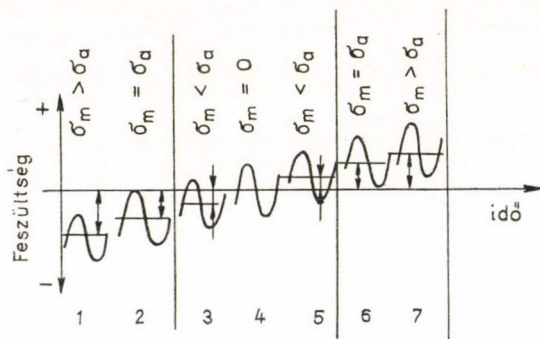


1. ábra. Egyszerű, időben szinuszosan változó feszültségfüggvény ( $2\sigma_a$  a feszültségterjedelem,  $\sigma_m$  a közép feszültség)

Az alkalmazott feszültségek közül a húzófeszültséget tekintjük pozitívnak, míg a nyomófeszültséget negatívnak. Ha az  $R_S$  feszültségarány pozitív, akkor lüktető, ha negatív, akkor lengő feszültségről beszélünk. A lengő feszültség akkor szimmetrikus, ha a  $\sigma_m$  közép feszültség zérus. A terhelés különböző típusait a 2. ábra mutatja.

$N$ -nel jelöljük az élettartamot, amely megadja a törést okozó igénybevételek, terhelésméltlódések számát.

$\sigma_N$  az  $N$ -szeres igénybevételre, illetve korlátozott időtartamra vonatkozó kifaradási határ, az az ismétlődő feszültség, amelyet a próbatest  $N$ -szer elvisel.  $\sigma_N$ -et tartamszilárdságnak szokás nevezni.



2. ábra. Különböző feszültségtípusok: 1, 2 lüktető-nyomó, 3, 4, 5 lengő, 6, 7 lüktető-húzó feszültség.

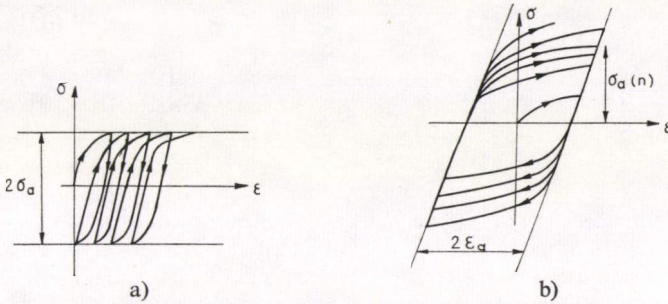
A 4. jelű szimmetrikus, a többi aszimmetrikus feszültség

A  $\sigma_D$  mennyiséget kifaradási határnak nevezzük. Ez az a legnagyobb feszültség-lengés, amelyet a vizsgált anyag végtelenszer elvisel. Ha  $\sigma_A$  a kifaradási határnak megfelelő lengő feszültség, akkor egy  $\sigma_m$  közép feszültség esetén:  $\sigma_D = \sigma_m + \sigma_A$ . Megjegyezzük, hogy egyes fémeknél, illetve bizonyos körülmények esetén a kifaradási határ meghatározása nem lehetséges.

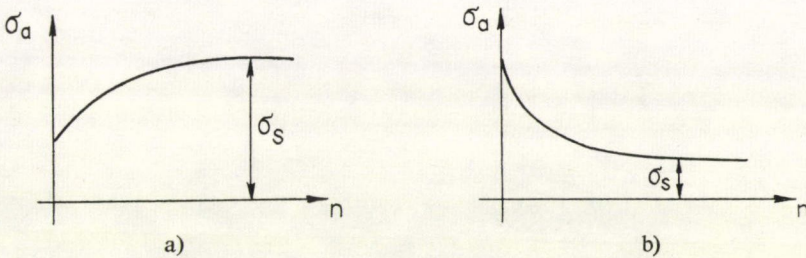
Az eddigiekben a fárasztási vizsgálatok azon fajtájával foglalkoztunk, amikor a ciklikus deformáció rögzített feszültségértékek között történik. Ha ebben az esetben ábrázoljuk a feszültség-deformáció összefüggést, akkor a 3a. ábrához hasonló



függvényt kapunk. A fárasztás másik lehetősége a rögzített deformációértékek közötti ciklikus deformáció, amelynek diagramját a 3b. ábra mutatja. Ekkor az egymást követő ciklusokhoz tartozó  $\sigma_a$  csúcsheszültség a fárasztás során egészen addig változik, amíg valamely  $\sigma_s$  telítési feszültséget el nem ér. Ha a csúcsheszültséget

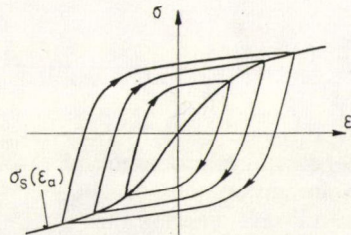


3. ábra. Fárasztási vizsgálatok jellegzetes feszültség-deformáció függvényei: a) rögzített feszültségértékek közötti, b) rögzített deformáció értékek közötti ciklikus terhelések esetén



4. ábra. Rögzített deformáció melletti fárasztáskor a csúcsheszültségek a ciklusszámmal a) monoton nőnek keményedő anyag esetén, míg b) monoton csökkennek lágyuló anyag esetén

a ciklusszám függvényében ábrázoljuk, monoton függvényt kapunk, amely keményedő anyag esetén növekszik (4a. ábra), míg lágyuló anyag esetén csökken (4b. ábra). Mindkét esetben a görbét egy gyorsan keményedő (illetve lágyuló) és egy telítési szakaszra oszthatjuk. A gyorsan változó szakasz előélettől függően a teljes törési idő 20–50%-a. A  $\sigma_s$  telítési feszültség is lehet előéletfüggő, de vannak olyan anyagok, amelyekre  $\sigma_s$  egyértelmű (pl. Cu, Al, Ni, Fe, Ag) [1]. A telítési feszültség természetesen függ a rögzített deformáció értékétől. Ezt a függést, vagyis a  $\sigma_s(2\varepsilon_a)$  görbét úgy kaphatjuk meg, hogy a különböző deformációkhoz tartozó telítési hiszterézisgörbék, amelyeket  $n \rightarrow \infty$  ciklus után ér el az anyag, a 3b. ábrán együttesen ábrázoljuk a feszültségdeformáció diagramon (5. ábra). Megjegyezzük, hogy a deformáció amplitúdó növelésével gyorsabban keményedik az anyag [2].



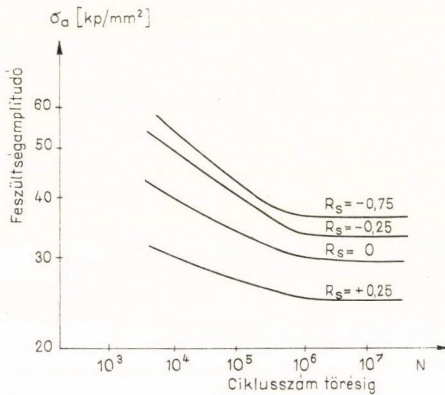
5. ábra. A telítési feszültség függése a rögzített deformációs értékektől



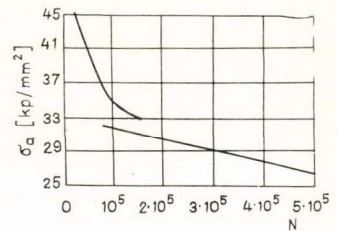
### 3. A vizsgálati eredmények kiértékelése

Wöhler már a múlt században felismerte [3], hogy a törésig elviselt terhelésméltódések száma és a terhelőfeszültség között fordított összefüggés áll fenn. Róla nevezték el a fárasztási vizsgálatoknál leghasználatosabb diagramot, amelynél az abszcisszára az élettartam, az ordinátára a feszültség amplitúdót kell felvenni. A terhelésméltódések számát mindig logaritmikus léptékben kell felvenni, hiszen egy szokásos fárasztási vizsgálat esetén az élettartam  $10^6$ – $10^7$  ciklust jelent, míg a kifáradási határ eléréséhez szükséges „végtelen ciklus”  $10^7$ – $10^8$  között mozog anyagtól függően.

A 6. ábrán jellegzetes Wöhler-görbe sorozatot mutatunk be [4]. A Wöhler-diagram jól érzékelteti, hogy az anyagi jellemzőkön kívül a terhelés mértéke és módja is befolyásolja a törésig szükséges terhelésméltódések számát. Egyrészt nagyobb terhelést kevesebb ciklusszámszor visel el az anyag, másrészt a lengő terhelésnek jobban ellenáll, mint a lüktető-húzó igénybevételnek, amint azt az  $R_S$  feszültségarány változásból leolvashatjuk. Az  $R_S$  értékek helyett szokásos még a  $\sigma_m$  közepfeszültség megadása is. A Wöhler-görbe végső aszimptotikus feszültségértéke a kifáradási határ.



6. ábra. Jellegzetes Wöhler-görbe sorozat különböző feszültségarányok esetén

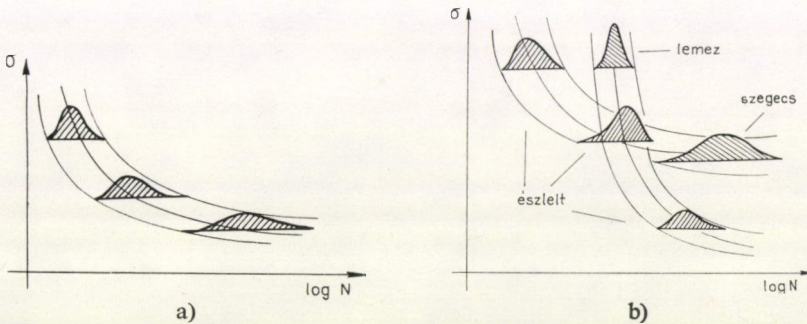


7. ábra. Al—Cu—Mg-ötvözet húzó-lüktető fárasztásával nyert szakadási Wöhler-diagram

Megjegyezzük, hogy a Wöhler-diagram lehet egyes helyeken több értékű is, amint azt a 7. ábra mutatja, amikor is egy Al—Cu—Mg-ötvözetet húzó-lüktető igénybevétellel fárasztottak [5]. A szakadáshoz tartozó feszültség értéke megegyezik a folyáshatárral. A többértékűség okának magyarázatában eltérőek a vélemények; lehet, hogy a rugalmas és a képlékeny alakváltozás közötti különbségek okozzák, vagy egyszerűen nem a valódi feszültséggel számolnak a folyáshatárnál nagyobb feszültségek esetén, mert nem veszik figyelembe a képlékeny alakváltozás keresztmetszet-csökkentő hatását, más vélemény szerint a nagyobb ismételt alakváltozás hatására a próbatest helyileg felmelegszik és a hő hatására szövetszerkezeti változások következnek be [6].



A fárasztási vizsgálatra jellemző, hogy az azonos anyagon végzett azonos mérések eléggé szórnak. Ez nem a módszer, vagy a próbatest elkészítésének hibája, hanem a kifáradás jelenségének velejárója. A szórás többek között azoktól a véletlen tényezőktől függ, amelyek az első szubmikroszkopikus repedések keletkezését és a repedés terjedését befolyásolják. Ezért a vizsgálatot nagyszámú próbatesten kell végezni, és ezekből eloszlásfüggvény (célszerűen a Weibull-eloszlás [7]) segítségével kell meghatározni azt a feszültség szintet, amely az adott szerkezetre előírt törési valószínűséghez tartozik. A 8a. ábrán egy egyszerű Wöhler-diagramon érzékeltetjük az eloszlásfüggvény változását a ciklusszám növekedésének hatására. A 8b. ábrán egy szegecselt lemez fárasztási Wöhler-görbéje látható [8]; mind a görbe, mind az eloszlásfüggvény összerakható külön a lemezre és külön a szegecsre felvett fárasztási görbékből, illetve eloszlásokból, mivel mindig az alacsonyabb tartam-szilárdság a meghatározó. Az átfedési tartományban látható módon az eloszlásfüggvény torzul.



8. ábra. Az eloszlásfüggvény változása a ciklusszám növekedésével

a) egyszerű Wöhler-diagramon,  
b) egy szegecselt lemez összetett Wöhler-görbéje esetén

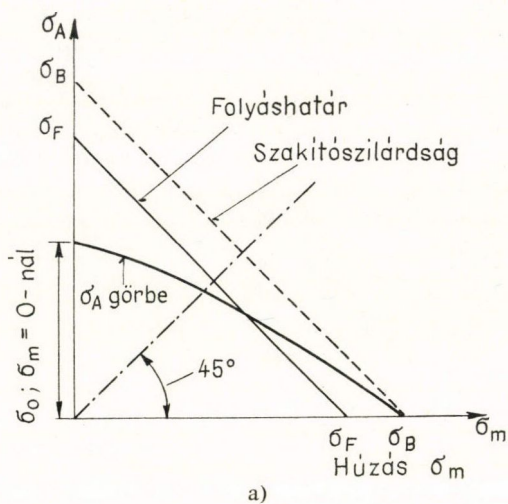
A Wöhler-görbékből adódó kifáradási határokból kifáradási határgörbék szerkeszthetők. A görbék által határolt területen belül eső feszültségciklusok a meghatározott élettartam alatt nem okoznak törést.

A Haigh-diagram az eredményeket a  $\sigma_m$  közép feszültség függvényében megadott feszültségamplitúdóval ábrázolja [4]. Az elméleti diagramot a 9a. ábra mutatja. A 9b. ábra a 6. ábrán közölt Wöhler-görbe sorozat alapján szerkesztett Haigh-diagramot ábrázol.

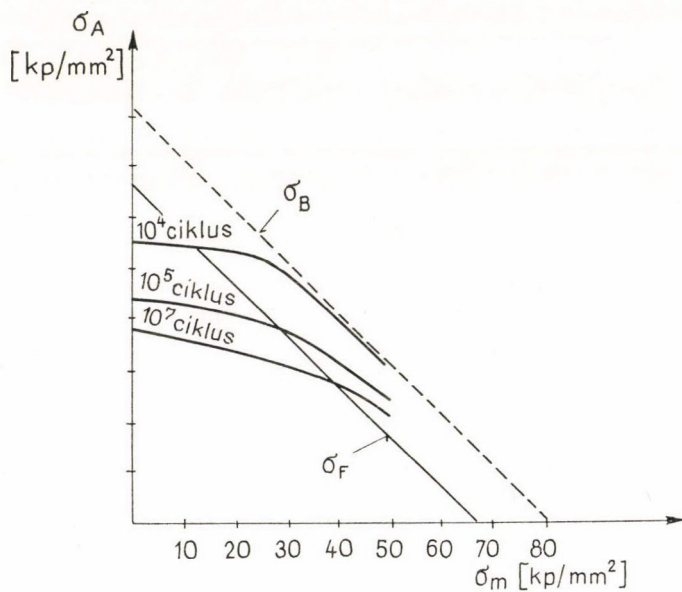
A Smith-diagram határgörbéit úgy kapjuk, hogy a  $\sigma_{\max}$  és a  $\sigma_{\min}$  értékeket a  $\sigma_m$  közép feszültség függvényében ábrázoljuk [4]. A 10a. ábra az elméleti diagramot mutatja. A 10b. ábra a 6. ábrán bemutatott Wöhler-görbe sorozat alapján szerkesztett tényleges diagramot ábrázolja.

A Pohl-diagram esetén a biztonsági területet úgy kapjuk meg, hogy egy adott ciklusszámhoz tartozó tartam-szilárdság értékeket egy  $k$  tényező függvényében ábrázoljuk;  $k$  a közép feszültség és a maximális feszültség hányadosa, vagyis  $k = \sigma_m / \sigma_{\max}$ . Egy Al—Cu—Mg-ötvözet esetén  $3 \cdot 10^7$  ciklusszám mellett a kapott Pohl-diagram a 11. ábrán látható [9].



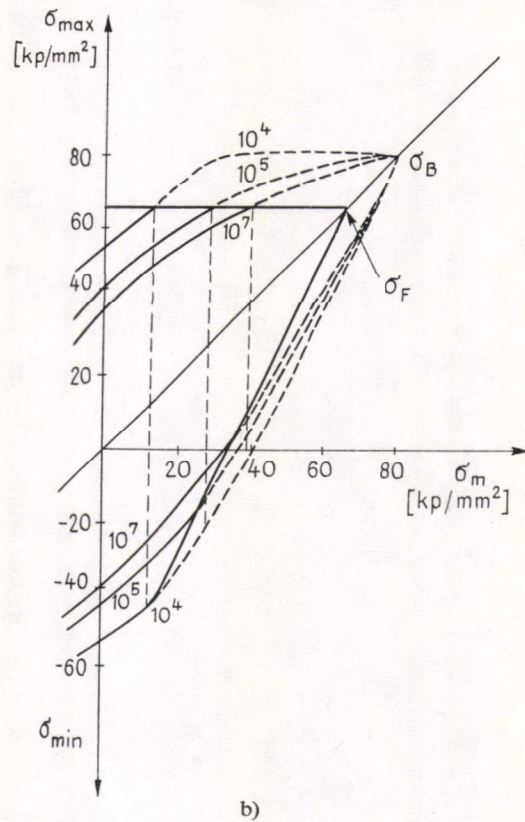
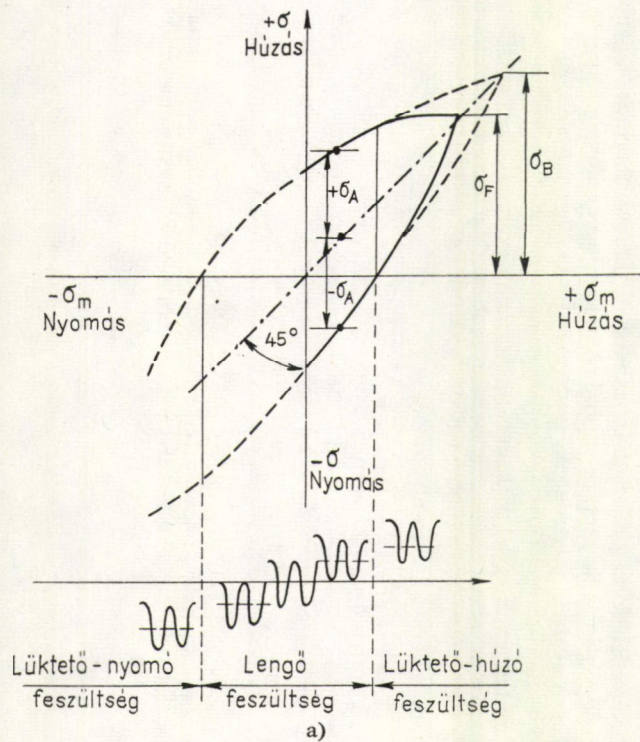


a)



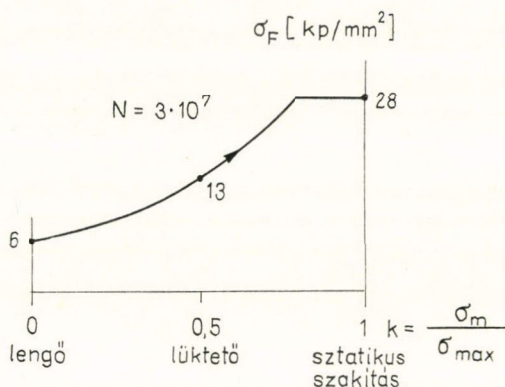
b)

9. ábra. Haigh-diagram, a) elméleti eset, b) a 6. ábrán közölt Wöhler-görbe sorozat alapján szerkesztett tényleges diagram



10. ábra. Smith-diagram,  
a) elméleti eset, b) a 6. ábrán közölt Wöhler-görbe sorozat alapján szerkesztett tényleges diagram





11. ábra. Al—Cu—Mg-ötvözet Pohl-diagramja  
 $3 \cdot 10^7$  ciklusszám mellett

#### 4. A fárasztáskor fellépő mikroszerkezeti jelenségek

Fárasztás során a véges élettartamot repedések kialakulása okozza [10]. A fárasztási repedés kialakulása diszlokációs probléma. A folyamat során több lépést különböztethetünk meg. Először, a kezdeti ciklusokban a diszlokációsűrűség megnő, rendezetlen cellaszerkezet alakul ki. A kedvező orientációjú szemcsékben elcsúszások jönnek létre, ilyenkor a diszlokációmozgások teljesen ellentétesek lehetnek az alkalmazott feszültséggel. Az új diszlokációk mozgását a lokális csúszási zónák határozzák meg. Néha előfordul diszlokációeltűnés is, amely alakítási lágyulást okoz. Az alakítási lágyulás, a helyi rekrisztallizáció, a túlóregedés, a ponthibák tömörülése stb. termikusan aktivált folyamatok, amelyek a fárasztás szempontjából másodlagos effektusoknak tekinthetők [11].

Második lépésben a kialakult erős csúszási sávok a szabad felületre kiemelkednek, ill. bemélyednek. Az összes diszlokációs modell ezt a folyamatot kersztcsúszással magyarázza. A helyi keményedés következtében a képlékenység csökken, így szubmikroszkópos repedések jelennek meg.

A harmadik lépésben a repedések növekedni kezdenek, szemcséről szemcsére a csúszósíkok mentén cikcakkosan terjednek. Az így megnőtt repedések bemetszésként hatnak, ez feszültségtorlódásokhoz vezet, ami a repedések továbbterjedését okozza, így azok makrorepedésekké nőnek össze. Amikor a megmaradó keresztmetszet már annyira lecsökken, hogy a teljes terhelést már sztatikusan sem bírja el, bekövetkezik a teljes törés. A fárasztás 99%-a a repedések fejlődése.

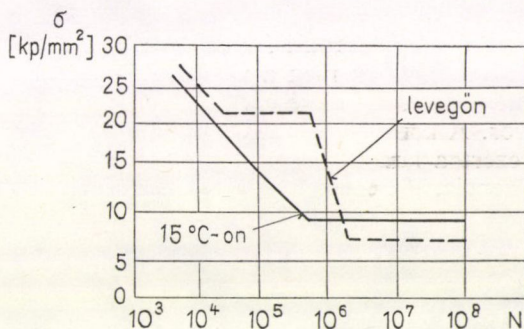
A fáradt töreten két egymástól eltérő felületrész különböztethető meg. Egyrészt a fáradt repedés látható, amely sima és semmi alakváltozást nem mutat, másrészt megkülönböztethető a sztatikusan törött felületrész, amely egyenlőtlen, tépett jelleget mutat [12].



### 5. A kifáradást befolyásoló egyéb tényezők

A kifáradási határ általában nem anyagjellemző. Ennek az az oka, hogy ha megkötjük a terhelés típusát és a feszültségismétlődések módját, még mindig kötetlen számos tényező. A következőkben a leglényegesebb kifáradást befolyásoló tényezőket tekintjük át.

Tekintsük először a hőátadást, amely úgy jelentkezik, hogy az ismételt alakváltozás hatására a próbatest felmelegszik és így megváltozik a szövetszerkezete. A 12. ábrán egy Al—Cu—Mg ötvözet forgó-hajlítógató igénybevételének két Wöhler-diagramját láthatjuk, amelyeket szobahőmérsékletű levegőn, valamint izotermikus 15 °C-os fürdőben végzett fárasztás után kaptak [13]. A két Wöhler-görbe között jól megfigyelhető a különbség.



12. ábra. Al—Cu—Mg ötvözet forgó-hajlítógató igénybevételének Wöhler-diagramja szobahőmérsékletű levegőn, illetve 15 °C-os fürdőben végzett fárasztás esetén

A különböző hőmérsékleteken izotermikusan végzett fárasztóvizsgálatok közötti különbség a fentiek alapján érthető. Figyelembe kell még azt is venni továbbá, hogy növelt hőmérsékletű fárasztó vizsgálatoknál, nullától eltérő közép-feszültségek hatására a kúszás is megindulhat. (A kúszás egyes fémeknél, pl. alumíniumnál, már szobahőmérsékleten is bekövetkezik, így ezen fémeknél kifáradási határról nem is beszélhetünk, a fáradásra jellemző mennyiség ilyenkor a tartamzilárdság.)

Jelentős befolyásoló tényező az anyag belső feszültségi állapota. Ha a belső feszültség lokálisan az alkalmazott feszültséggel azonos előjelű, akkor a kifáradási határt az ilyen helyen csökkenti, ha ellentétes előjelű, akkor  $\sigma_D$ -t növeli. Észrevehető a szemcseméret okozta effektus is, durvább szemcseszerkezet esetén  $\sigma_D$  kisebb [14–16].

A bemetszések hatását horonyhatásnak nevezzük, ennek következtében feszültségtorlódás, feszültségcsúcsok jönnek létre, így a kifáradási határ csökken. Az anyag zilárdságával egyre fokozódik a bemetszésérzékenység. A bemetszések kifáradási határt csökkentő tényezőjét a nem bemetszett anyagokkal való összehasonlításból állapíthatjuk meg. A gyakorlatban ez a hatás azért jelentős, mert pl. hegesztési varratok vagy szegecsek bemetszésként hatnak. A felületi állapot hatása is a bemetszésekkel magyarázható, mivel a felületi egyenetlenségek is bemetszésként

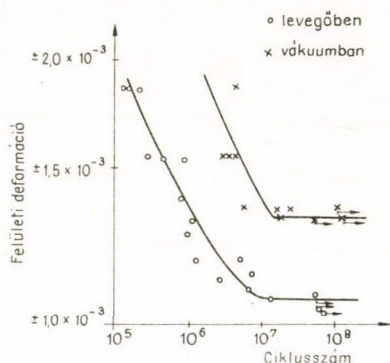


hatnak. Így érthető, hogy a kifáradási határ a legnagyobb a polírozott felületű próbatesteknél. A próbatest rossz befogásából származó dörzsoxidáció is bemetszés-ként jelentkezik, ezért néha a próbatest a befogófejnél törik [17].

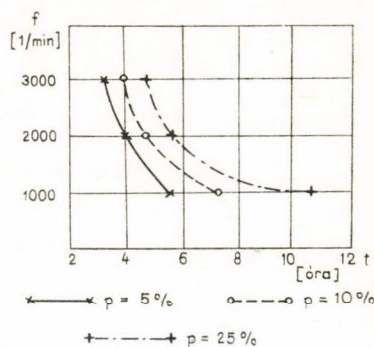
A kifáradási tulajdonságokat még az anyagot körülvevő közeg is befolyásolja, részben korróziós hatás, részben a felületi feszültség megváltoztatása révén. Alumínium alapú anyagok esetében a kifáradás és a korróziós kifáradás közötti határ elmosódott, mert a vákuumban fárasztott alumínium próbatestek kifáradási határa határozottan nagyobb, mint a levegőn fárasztottaké, vagyis a levegőn bekövetkező kifáradás is korróziós kifáradásnak tekinthető.

A levegő hatásának szemléltetésére mutatjuk be a 13. ábrát, amely 0,5% C-et tartalmazó nagy tisztaságú vasötvözet Wöhler-görbéit mutatja részben vákuumban, részben levegőn végzett fárasztóvizsgálat alapján [18]. A felületi feszültség hatását bevonatokkal lehet befolyásolni. Azok a bevonatok, amelyek a felületi feszültséget csökkentik, növelik a kifáradási határt. Másrészt viszont a bevonatok a korróziót is gátolják, és ilyen módon is a kifáradási határ növelését eredményezik.

Jelentős tényezőként említjük még a vizsgálati frekvencia hatását, miután egy bizonyos terhelésméltóidési szám elérésének időszükséglete a vizsgálati frekvenciával egyenesen arányos. A korróziós hatás, az oxidálódás, illetve a kúszás sebessége az idő függvénye, ezért a fárasztóvizsgálatok eredményeit jelentősen befolyásolja az alkalmazott frekvencia. Ezt érzékelteti a 14. ábra, mely AlZnMgTi próbatestek



13. ábra. 0,5% C-et tartalmazó nagy tisztaságú vas próbatest Wöhler-görbéi levegőn, illetve vákuumban



14. ábra. A fárasztási frekvencia hatása a kifáradásra Al—Zn—Mg—Ti próbatestek esetén

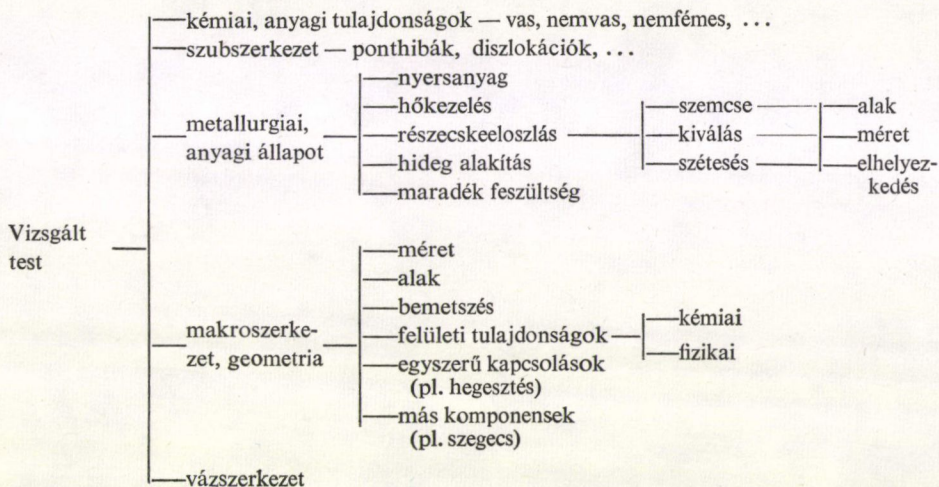
törésig eltelt idejét mutatja be 1000, 2000 és 3000/min, frekvenciával mesterséges tengervízben (a korróziós hatás növelése miatt) 10 kp/mm<sup>2</sup> feszültséggel végzett forgó-hajlító vizsgálatra vonatkozóan [19]. Az ábrán Weibull-eloszlás alapján értékelve, az 5, 10 és 25% törési valószínűséghez tartozó idők vannak feltüntetve. Az ábráról megállapítható, hogy korróziós közegben a töréshez tartozó igénybevételei szám a frekvenciával általában nő, a törésig eltelt idő pedig a frekvenciával általában csökken.

A kifáradást befolyásoló tényezőket az 1. és 2. táblázatba gyűjtöttük össze, ahol ezeket a vizsgálandó próbatest, az alkalmazott feszültség és a környezet hatásaként osztottuk fel három nagy csoportba.

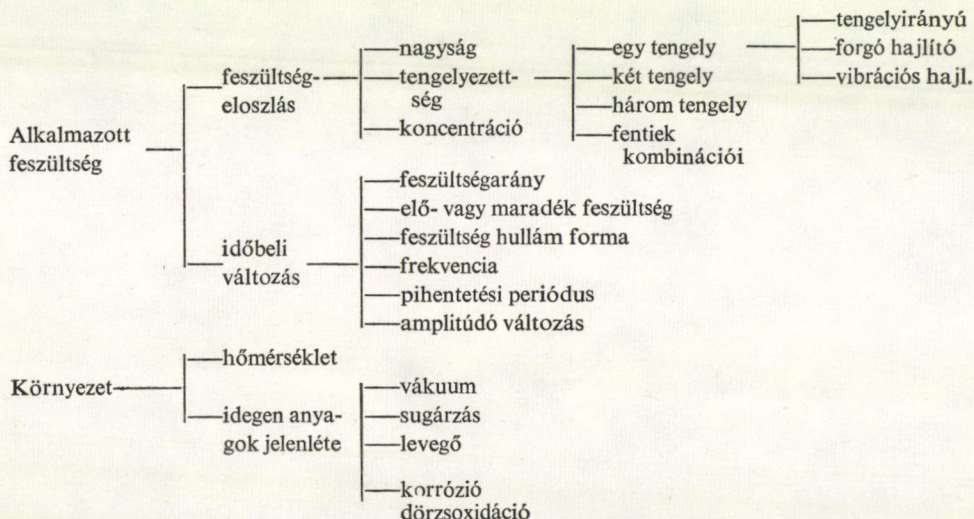


Az 1. és 2. táblázatban található számos befolyásoló tényező indokoltta teszi, hogy a kifáradási határt miért nem lehet általában anyagjellemzőnek tekinteni. A sokfajta befolyásoló tényező magyarázza azt is, hogy a kifáradási folyamatnak miért nem született még átfogó anyagszerkezeti magyarázata. Végül így válik érthetővé, hogy a mérnöki gyakorlatban, ha egy bonyolultabb szerkezet (pl. teherautó-vezetőfülke) fárasztási tulajdonságaira van szükség, akkor semmilyen más megbízható módszer nem létezik, mint az egész szerkezetet 1:1-ben legyártani és egy megfelelő fárasztógépben ezen elvégezni a vizsgálatot.

1. TÁBLÁZAT



2. TÁBLÁZAT





## IRODALOM

1. *P. G. Forrest*: Fatigue of Metals, Pergamon Press Oxford, 1962.
2. *R. F. Bunshah*: Techniques of Metals Research, Vol. V., Part 1, John Wiley and Sons, New York, 1970.
3. *A. Z. Wöhler*, Bauw. 8, 642, 1858; 10, 583, 1860; 13, 233, 1863; 16, 67, 1866; 20, 74, 1870; Engineering, 11, 199, 1871.
4. Fémek, ötvözetek szilárdsági vizsgálatok, Fárasztóvizsgálat, Magyar Népköztársasági Országos Szabvány, MSZ 105/14—72, C 09, 1973.
5. *V. I. Sabalin*, Dokl. Akad. Nauk SZSZSZR, 122, 600, 1958.
6. *C. Panseri* and *L. Mori*, Alluminio, 31, 61, 1962.
7. *W. Weillbull*: Fatigue Testing and Analysis of Result, Pergamon Press, Oxford, 1961.
8. *R. J. Ryman*, Aircr. Engng. 34, 34, 1962.
9. *Domony András*: Alumínium kézikönyv, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1967.
10. *N. E. Frost*, *K. J. Marsh* and *L. P. Pook*: Metal Fatigue, Clarendon Press, Oxford, 1974.
11. *A. F. Madayag*: Metal Fatigue: Theory and Design, John Wiley and Sons, New York, 1969.  
*J. C. Grosskreutz*, phys. stat. sol. (b) 47, 11, 359, 1971.
12. *C. Lipson*: Why Machine Parts Fails, Penton, Cleveland, Ohio, 1950.
13. *C. Panseri* and *L. Mori*, Alluminio, 32, 213, 1963.
14. *F. H. Vitovec*, Wright Air Development Centre, Tech. Note, 58, 539, 1958.
15. *T. Yokobori*, Proceedings of the 2nd Japanese Congress on Testing Materials, 1959. p. 10.
16. *A. Yoshikawa* and *T. Sugento*, Trans. Metall. Soc. AIME, 233, 1314, 1965.
17. *A. J. Fenner* and *J. E. Field*, N. E. Coast Inst. Engrs. and Shipbuilders, 76, 183, 1960.
18. *N. J. L. Wadsworth*, Phil. Mag. 6, 397, 1961.
19. *W. J. Harris*, Aircraft Engineering 31, 352, 1959.

# A KÉPLÉKENY ALAKÍTÁS VIZSGÁLATI MÓDSZEREI

## 10. A TÖRÉS VIZSGÁLATA

SÁRAY ISTVÁN

ELTE, Általános Fizika Tanszék

### TARTALOM

1. Bevezetés .....	117
2. A törés Griffith-féle mechanizmusa .....	117
3. Repedés stabilitási kritérium .....	119
4. A $G$ függvény kísérleti meghatározása .....	120
5. A feszültségintenzitási faktor .....	123
6. Irodalom .....	125

### 1. Bevezetés

A szilárd anyag mechanikai anyagjellemzői legtöbb esetben a mindennapi élet minősítő jelzőinek egyszerű általánosításai, precízebb megfogalmazásai. Az üvegre, kerámiára, öntött vasra azt mondjuk, hogy „törékeny”, az alumínium, a réz, a lágyvas „szívós”, ugyanakkor az üveg „kemény”, a tiszta réz, az alumínium pedig „puha”, „lágy”.

A szívósság alatt a hétköznapi nyelv azt érti, hogy nehezen lehet az illető anyagdarabot széttörni, szétszakítani, bár lehet, hogy ugyanakkor viszonylag könnyen meg lehet változtatni az alakját. A keménység viszont az anyagnak a karcolással, egy másik test benyomódásával szembeni ellenállását jelenti a hétköznapi szóhasználatban. Az üveg kemény, de törékeny (=nem szívós), a réz szívós, de puha, a szerkezeti acél pedig kemény és szívós is egyszerre: ezek a megkülönböztetések jól érthetők a nem anyagvizsgálattal foglalkozó szakember számára is.

A szívósság pontosabb anyagvizsgálati fogalmának megalkotásához azonban már bizonyos felismerésekre volt szükség a törési mechanizmusra vonatkozólag.

### 2. A törés Griffith-féle mechanizmusa

A törési folyamatot az 1. fejezetben tárgyalt szakítóvizsgálattal kapcsolatban tanulmányozzuk. A nyújtás során az anyag először rugalmasan megnyúlik, majd több-kevesebb képlékeny alakváltozás után elszakad. E közben a valódi feszültség monoton növekszik  $\sigma_c$ -ig, a törési szilárdságig. Bizonyos anyagoknál és bizonyos körülmények között az a tartomány, amelyen belül a képlékeny alakváltozás történik egészen szűk, ezt az esetet ridegtörésnek nevezzük. Most ezzel foglalkozunk.

Próbáljuk megbecsülni a  $\sigma_c$  értékét egy olyan kézenfekvőnek látszó modell alapján, amely szerint a törés úgy következik be, hogy a test a húzóerő hatására



egy, a külső feszültségre merőleges sík mentén kettéválik. A feszültség kezdetben a Hooke-törvény szerint növekszik:

$$\sigma = E \cdot x/a_0, \quad (1)$$

ahol  $a_0$  a nyugalmi rácsállandó,  $x$  pedig a rácsállandó megváltozása. Ha a szakítódiagram egyenes volna egészen a törésig, akkor  $\sigma_c$  nagyságrendileg az  $E$  Young-modulusszal egyezne meg, mivel kétszeres rácsállandónyi távolságban ( $x \sim a_0$ ) az atomok vonzóereje gyakorlatilag zérusra csökken, így

$$\sigma_c \sim E \quad (2)$$

lenne. Pontosabb becslést kaphatunk  $\sigma_c$ -re a  $\gamma$  fajlagos felületi energia felhasználásával, amelyre elméleti és kísérleti értékek ismeretesek [1]. A felületek elválásakor végzett munka ugyanis az újonnan képződött határfelületek energiájában raktározódik el, tehát

$$\int_0^a \sigma dx = 2\gamma \quad (3)$$

ahol  $a$  a kötőerők effektív hatósugara.  $\sigma$ -ra ésszerű helyfüggést feltételezve a (3) alapján becsülhető törési feszültség [1]:

$$\sigma_c \cong \sqrt{E\gamma/a_0}. \quad (4)$$

Ezt az értéket elméleti szilárdságnak is nevezik. Felületen centrált és tércentrált köbös fém esetében nagyságrendi becslésre  $\gamma/a_0 \sim 0,04 E$  vehető [1], amivel

$$\sigma_c \cong E/5. \quad (5)$$

A tapasztalat szerint ezzel szemben a valóságos szilárdsági értékek jóval alacsonyabbak, nyújtásnál az  $E/150$ — $E/100$  tartományban vannak, vagyis lényegesen kisebbek az elméleti szilárdságnál.

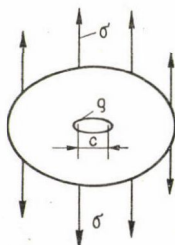
Griffith [2] egy, a valóságos törési folyamatot jobban közelítő modellel számolva, a tapasztalattal egyező értékeket kapott  $\sigma_c$ -re. Feltételezte ugyanis, hogy a törési felületek szétválasztása nem egyszerre történik, hanem repedés kezdemények növekedése útján. Ilyen repedés kezdemények, mikrorepedések számos ok miatt kerülhetnek az anyagba a megelőző technológiai műveletek (öntés, képlékeny alakítás vagy a használat (kifáradás) során.

Legyen egy  $\sigma$  külső feszültséggel terhelt testben a külső feszültségre merőleges síkban fekvő, elnyújtott ellipszis keresztmetszetű mikrorepedés. A legnagyobb feszültségkoncentráció a repedés legkisebb,  $\rho$  görbületi sugarú részének környezetében lép fel (1. ábra), amelynek értéke [2]:

$$\sigma_m = \sigma \sqrt{c/\rho}, \quad (6)$$

ahol  $c$  az ellipszis fókuszpontjainak a távolsága. A törés feltétele most az, hogy (6) elérje a (4) elméleti értéket. (6) és (4) összevetéséből a szakító szilárdság ekkor:

$$\sigma_c = \sqrt{E\gamma\rho/ca_0}. \quad (7)$$



1. ábra. Ellipszis keresztmetszetű repedés külső feszültség alatt levő ellipszis alakú lemezben a Griffith-féle modellhez



$\varrho$  legkisebb értelmes értéke a rácsállandó lehet. Ezt figyelembe véve, és  $c=1000a_0$  nagyságú repedést feltételezve, a ridegtörésnél megfigyelt szilárdsági értékek értelmezhetők.

A Griffith-modellből következik, hogy a  $\sigma_c$  törési szilárdság nem tekinthető a szívósságra vonatkozó anyagjellemzőnek, hiszen (7)-ben a repedés geometriájára jellemző adatok is vannak, mint  $\varrho$  és  $c$ . A  $\gamma$  felületi energia viszont anyagi állandó, amely jellemzi a terhelés alatt levő anyagnak az ellenállását a repedés tovaterjedésével szemben. Minél nagyobb a  $\gamma$ , annál stabilabb a repedés.

A törékenység, illetve szívósság mérőszámául  $\gamma$ -t érdemes tehát használnunk. Megoldva az adott terhelési módra és repedésgeometriára a rugalmassági problémát,  $\gamma$  ismeretében kiszámíthatjuk a  $\sigma_c$  törési szilárdságot bármilyen adott esetre. Fordítva, ha a rugalmassági probléma megoldása ismert, akkor  $\sigma_c$  mérésével a  $\gamma$  felületi energia mint szívóssági jellemző megadható. Ez a módszer azonban kevésbé gyakorlati, a következőkben ezért általánosabb koncepciókat igyekezünk megfogalmazni.

### 3. Repedés stabilitási kritérium

Ha feltételezzük, hogy a repedés tovaterjedése során nem zajlanak le disszipatív folyamatok, akkor egy energiámérleg felírásával közvetlenül mérhető mennyiségeket definiálhatunk, amelynek segítségével módot találhatunk a fajlagos energia kísérleti meghatározására is. Amikor a repedést tartalmazó mintát megterheljük, akkor az rugalmas energiára tesz szert. Ez a rugalmas energia azonban kisebb, mintha az anyag repedést nem tartalmazna, hiszen a repedés környezetében az anyag mintegy „kienged”. A relaxált anyagrész kiterjedése szélességben és hosszúságban durván a repedés-hosszal egyezik meg, tehát kb. a  $c$  repedéshosszúság négyzetével nő. A repedés kiterjedésének következtében egyidejűleg változhat a külső terhelés által végzett munka is.

Definiáljuk a  $G$  mennyiséget mint a rugalmas energia felszabadulásának mértékét, midőn a repedés felülete egységnyit növekszik. Legyen  $U$  a testben a külső terhelés hatására felhalmozódott rugalmas energia, és  $W$  a test által a környezeten végzett munka. Ha a repedés pl. a 2. ábrának megfelelő, egyszerű geometriájú, amelyet egyedül a  $c$  repedéshosszal jellemezhetünk, akkor

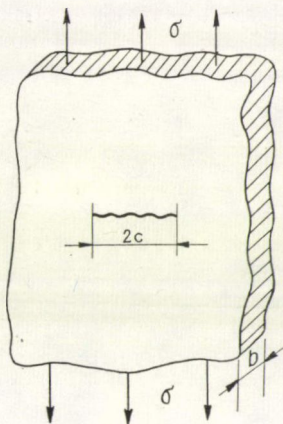
$$G = -(1/b)(dU/dc + dW/dc), \quad (8)$$

ahol  $b$  a repedés szélessége. Könnyen belátható, hogy az említett feltételek esetén a repedés stabilitásának kritériuma az, hogy az  $R$  fajlagos törési felületi energia nagyobb legyen, mint a felszabaduló rugalmas energia, vagyis

$$R > G, \quad (9)$$

a repedés tovaterjedésének a feltétele pedig:

$$R \leq G. \quad (10)$$



2. ábra. Végtelen lemez  $2c$  szélességű repedéssel, külső feszültség alatt



A  $G$  mennyiség általában a  $c$  repedéshossznak és a  $\sigma$  terhelőfeszültségnek a függvénye.

A 2. ábrának megfelelő geometriájú repedést tartalmazó, végtelen, lineárisan rugalmas lemezre — a rugalmas probléma ismert megoldásával —, konkrét formában is megadhatjuk a  $G(\sigma, c)$  függvényt [3]:

$$G = (\pi \cdot \sigma^2 c)(1 - \nu^2)/E, \quad (11)$$

ahol  $\sigma$  a külső feszültség,  $2c$  a repedés hossza,  $\nu$  a Poisson-szám. A (10) egyenlőtlenség és (11) alapján adott külső feszültségekhez megadható egy kritikus repedésméret, amelynél kisebbeket az adott terhelésnél még tartalmazhat az anyag a törés veszélye nélkül. Ez a következő:

$$c = ER/\pi\sigma^2(1 - \nu^2). \quad (12)$$

Ha viszont ismerjük a  $c$  repedésméretet, akkor megmérve a repedésterjedést éppen megindító  $\sigma_c$  feszültséget, és ezt (11)-be beírva, megkapjuk a törési energiát:

$$R = \pi\sigma_c^2 c(1 - \nu^2)/E. \quad (13)$$

A következő szakaszban látni fogjuk, hogy azt a kritikus  $G_c$  értéket, amelyre  $R=G_c$  érvényes, közvetlenül mérhetjük, tehát ennek alapján történhet a törési energia kísérleti meghatározása. Griffith nyomán a tökéletesen rideg anyagoknál  $R$ -et a fajlagos felületi energiával hozhatjuk összefüggésbe. Mivel ekkor képlékeny alakváltozás nincs, a felszabaduló energia csak a két új felület kialakulására fordítódik:

$$R = 2\gamma.$$

A (8) definíciós egyenlettel  $R$ -t  $\gamma$ -tól függetlenül tudtuk definiálni. Ez azért jó, mivel a  $\gamma$  felületi energia csak ideálisan rideg törés esetén jellemzi pontosan a törési folyamatot. Valóságos esetben mindig képlékeny alakváltozás is kíséri a törési folyamatot, ha máshol nem, legalább a repedés csúcsának közelében. Itt ugyanis a feszültség igen nagy értéket ér el, mivel a törési folyamatban szerepet játszó repedés csúcsa mindig nagyon éles ( $\rho \sim a_0$ ). A repedés szélének közelében emiatt egy plasztikus zóna alakul ki a legtöbb anyagnál, amelyen belül az anyag a húzási instabilitás állapotában van (lásd 1. fejezet).

Az „ $R$ ” törési energiába a felületi energián kívül beleértjük a repedés terjedése közben keletkezett diszlokációkban tárolódó energiát is. A repedés környéki képlékeny zóna azonban rendszerint kicsiny, hatását az  $U$  rugalmas energiára ezért elhanyagolhatjuk, ha az egész minta mérete a repedésmérethez viszonyítva nagy [4]. Ennek a ténynek a törési jellemző kísérleti vizsgálatában is fontos szerepe van (kalibráció).

#### 4. A $G$ függvény kísérleti meghatározása

A gyakorlatban használatos szabványosított, véges méretű testeknél a  $G(\sigma, c)$ , vagy a  $\sigma$ -val egyenértékű más, a terhelésre jellemző változóval felírt  $G$  függvény kísérleti megadása a terhelés-elmozdulás karakterisztikák mérésével lehetséges.

Tekintsük a 3. ábrának megfelelő mintát, amelyre a  $P$  terhelést a nyíllal jelzett helyen adjuk. Feltételezzük, hogy a minta lineárisan rugalmas viselkedést mutat.

Ekkor a terhelési pontok  $\delta$  elmozdulása arányos a  $P$  terheléssel:

$$\delta = \varphi P. \quad (14)$$

Itt a  $\varphi$  arányossági tényező, amelyet „kiengedési” együtthatónak nevezünk (kompliancia), csupán a repedést tartalmazó minta geometriájától és a rugalmassági moduluszoktól függ.

A (8) definíciós egyenlet szerint:

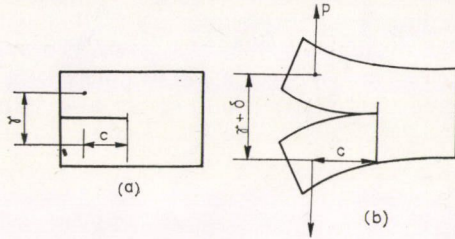
$$bGdc = -(dU + dW), \quad (15)$$

ahol a rugalmas energia:

$$U = (1/2)P\delta, \quad (16)$$

így

$$dU = (1/2)P d\delta + (1/2)\delta dP. \quad (17)$$



3. ábra. Törésvizsgálati mintatípus és terhelése

A test által a környezeten végzett elemi munka pedig:

$$dW = -P d\delta. \quad (18)$$

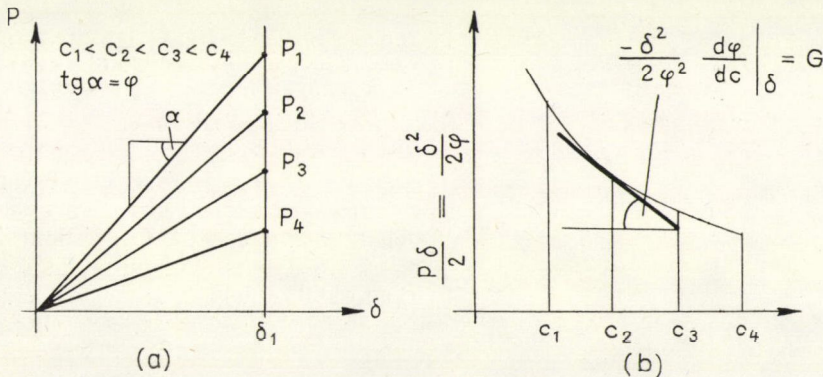
(17)-et és (18)-at (15)-be beírva, kapjuk:

$$bGdc = (1/2)\delta dP - (1/2)P d\delta \quad (19)$$

$P$  helyett bevezetve a  $\varphi$  kiengedési együtthatót, (19)-ből adódik, hogy

$$G = (1/2b)(\delta^2/\varphi^2)(d\varphi/dc). \quad (20)$$

A  $G$  rugalmas energiaszabadulási függvény ennek alapján meghatározható elvileg bármely minta és repedés-geometriára, ha mérjük a kiengedési együtthatót a repedéshossz függvényében. Ezt az eljárást kalibrációnak nevezik. A kalibrációhoz az előző szakasz végén tett megjegyzés szerint nem szükséges valódi repedéssel rendelkező minta, hanem vékony mesterséges bemetszéseket is alkalmazhatunk.

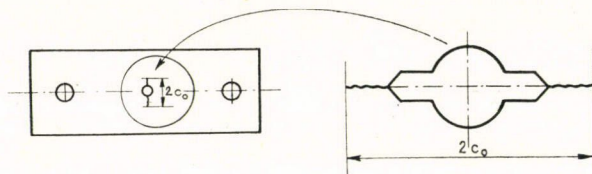


4. ábra. A  $G(\delta, a)$  függvény kalibrációja



Ebben az esetben a feszültség jóval meghaladhatja a valódi repedésre vonatkozó  $\sigma_c$  kritikus értéket.

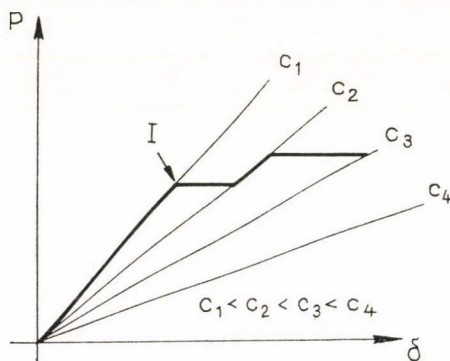
A kalibrációs eljárás lényegét a 4. ábrán vázoltuk. A megfelelő próbatest típus kiválasztása után a mintát érzékeny elmozdulásmérővel felszerelt terhelő gépbe helyezük, és  $P-\delta$  karakterisztikákat veszünk fel először bemetszés nélküli próbatesten, majd egyre mélyebb bemetszéseket készítve a mérést megismételjük. Így kapjuk a 4a görbesereget, amelyből triviális módon megszerkeszthető a 4b görbesereg, azaz a  $\delta^2/2\varphi^2$  mennyiség a  $c$  repedésméret függvényeként. A  $G$ -vel arányos  $d\varphi/dc$  mennyiséget grafikus differenciálással kapjuk ezekből a görbékéből. A görbesereg paramétere jelen esetben a  $\delta$  elmozdulás.



5. ábra. Bemetszés a próbatesten a fásztásos előrepreztéshez

Nem minden mintatípusnál tudjuk azonban kielégítő pontossággal ezen az úton a  $G$  függvényt meghatározni. Ilyen esetekben számításos módszerekre vagyunk utalva.

A  $G(\sigma, c)$ ,  $G(P, c)$ ,  $G(\delta, c)$  valamelyikének birtokában az  $R$  törési energiát megmérhetjük. Ehhez a méréshez azonban már valódi, éles repedésre van szükség. Ezt rendszerint fásztással hozzák létre, miután a mintán olyan bemetszést készítettek, hogy a repedés a kívánt helyen jöjjön létre (5. ábra).



6. ábra. Az instabilitási pontok megjelenése a  $P-\delta$  karakterisztikában

A mérés úgy történik, hogy a terhelést fokozatosan növelve, ismét felvesszünk  $P-\delta$  karakterisztikákat egészen az instabilitási határig. Meghatározva az adott repedésmérethez tartozó kritikus  $\sigma$ ,  $P$  vagy  $\delta$  értéket, amelynél a repedés instabillá válik, az ismert  $G$  függvény segítségével megkapjuk a kritikus  $G_c$  értéket, azaz  $R$ -et.

Az instabilitási határ egyszerűen a  $P-\delta$  karakterisztikáról olvasható le, hiszen amikor a repedésméret megváltozik, a görbe meredeksége is ugrást szenved, tehát a karakterisztikán töréspont jelentkezik (6. ábra). Az instabilitási határ pontosabb detektálására egyéb érzékeny

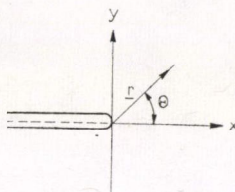
módszerek is ismeretesek, ezekről és a mérési probléma egyéb részleteiről Krafft [5] ad kimerítő tájékoztatást.

Megjegyezzük még, hogy  $G$  meghatározásának fenti módszere nem lineárisan rugalmas anyagokra is általánosítható, ezzel azonban itt nem foglalkozunk.



### 5. A feszültségintenzitási faktor

Amikor az  $R$  törési energiából szilárdságot számolunk, ismernünk kell az adott minta és repedés geometriához tartozó rugalmas probléma megoldását. *Inglis* [6], *Westergaard* [7], és *Sneddon* [5] számos repedéstípusra kidolgozott megoldásait vizsgálva *Irwin* [8] felismerte, hogy a repedés közvetlen közelében a repedés-



7. ábra. Jelölések  
a (21) képlethez

típustól és a minta geometriától függetlenül, az  $x$  tengely mentén fekvő repedés esetén ezek a következő azonos alakra hozhatók (7. ábra):

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= (K/(2\pi r)^{1/2}) \cos(\theta/2)[1 - \sin(3\theta/2) \sin(\theta/2)], \\ \sigma_{yy} &= (K/(2\pi r)^{1/2}) \cos(\theta/2)[1 + \sin(3\theta/2) \sin(\theta/2)], \\ \sigma_{zz} &= (K/(2\pi r)^{1/2}) \cos(\theta/2) \sin(3\theta/2) \sin(\theta/2), \\ \tau_{yx} &= \tau_{xz} = 0.\end{aligned}\tag{21}$$

Itt  $\theta$  az  $r$  vektor és az  $X$  tengely által bezárt szög (7. ábra). A (21)-ben szereplő  $K/(2\pi r)^{1/2}$  faktor mindegyik feszültségkomponensre nézve közös. Mivel ezek a feszültségkomponensek éppen a repedéscsúcs környezetét írják le a plasztikus zóna határán, amelyen belül zajlik az egész szakadási folyamat, lényegében a  $K$  tényező határozza meg az egész folyamatot.

A  $K$  együtthatót feszültségintenzitási faktornak nevezik. Ez nem tartalmaz anyagi állandókat, értékét kizárólag a repedés és a minta geometriája, valamint a terhelés határozza meg. *Irwin* javaslatára azt a kritikus  $K_c$  feszültségintenzitási faktort, amelynél a repedés instabillá válik, szintén általánosan használják szívóssági anyagjellemzőként.

*Irwin* igazolta a Griffith-féle szívóssági jellemző és a feszültségintenzitási faktor ekvivalenciáját. Kimutatta, hogy vékony lemezek esetén a Griffith-féle repedésre

$$G_c E = K_c^2, \tag{22}$$

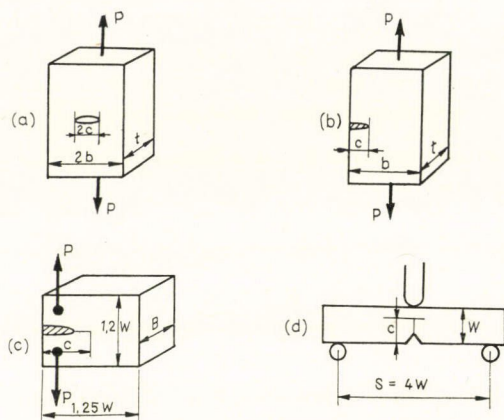
vastag mintáknál pedig

$$G_c E/(1-\nu^2) = K_c^2. \tag{23}$$

$K_c$  tehát éppúgy jellemzi az anyag szívósságát, mint  $G_c$ , azonban az utóbbinál kényelmesebben használható törésmechanikai problémák tárgyalásánál.  $K$  kifejezéseit számos különböző geometriákra és terhelési módokra kiszámították és a gya-



korlat számára legfontosabbakat szabványokban rögzítették. Néhányat ezek közül bemutatunk a 8. ábrán, illetve az 1. Táblázatban. A kritikus  $K_c$  érték kísérleti meghatározása a  $G_c$  meghatározásának előző szakaszban leírt módszerével teljesen azonos [9].



8. ábra. Néhány ASTM szabványos mintatípus. Az egyes próbatestekhez tartozó  $K$  függvények az 1. Táblázatban találhatók

# 1. TÁBLÁZAT

A 8. ábrán látható próbatestekhez tartozó  $K$  függvények

a) középen repszett lemez	$c \ll b$	$K = \sigma \sqrt{\pi c}$	$\sigma = \frac{P}{2b \cdot t}$
	$0 < \frac{c}{b} < 0,7$	$K = \sigma \sqrt{c} \left[ 1,77 + 0,22 \left( \frac{c}{b} \right) - 0,51 \left( \frac{c}{b} \right)^2 + 2,7 \left( \frac{c}{b} \right)^3 \right]$	
b) egy oldal- ról repesz- tett lemez	$c \ll b$	$K = 1,12 \sigma \sqrt{\pi c}$	$\sigma = \frac{P}{2b \cdot t}$
	$0 < \frac{c}{b} < 0,6$	$K = \sigma \sqrt{c} \left[ 1,99 - 0,41 \left( \frac{c}{b} \right) + 18,7 \left( \frac{c}{b} \right)^2 - 38,48 \left( \frac{c}{b} \right)^3 - 53,85 \left( \frac{c}{b} \right)^4 \right]$	
c) szakító próbatest	$c, B \cong 2,5 \left( \frac{Kc}{\sigma_F} \right)^2$	$K = (P/B \sqrt{W}) [29,6 (c/W)^{1/2} - 185,5 (c/W)^{3/2} + 655,7 (c/W)^{5/2} - 1017 (c/W)^{7/2} + 638,9 (c/W)^{9/2}]$	$W \cong 2B$
d) három ponton hajlított próbatest		$K = (P \cdot S / B \cdot W)^{3/2} [2,9 (c/w)^{1/2} - 4,6 (c/w)^{3/2} + 21,8 (c/w)^{5/2} - 37,6 (c/w)^{7/2} + 38,7 (c/w)^{9/2}]$	

## IRODALOM

1. *A. Kelly*: Strong Solids, Clarendon Press, Oxford, 1966.
2. *A. A. Griffith*, Phil. Trans. *A221*, 163, 1920.
3. *A. A. Griffith*, Proc. Int. Congr. Appl. Mech. Delft, 1924. p. 55.
4. *I. N. Sneddon*, Proc. Roy. Soc. *A187*, 229, 1946.
5. *J. M. Krafft*: Test for Fracture Strength, Techniques of Metal Research, ed. R. F. Bunshah, John Wiley, 1971.
6. *G. E. Inglis*, Trans. Inst. Naval Archiv. *55*, 219, 1913.
7. *H. M. Westergaard*, J. Appl. Mech. *6A*, 49, 1939.
8. *Irwin, G. R.*: Fracturing of Metals, Amer. Soc. Met., Chicago, 1948.
9. *G. T. Hahn*: Atomic Structure and Mechanical Properties of Metals, North Holland, Amsterdam, 1976. p. 346.



MACLE  
HISORANYSI ACAD  
KONYVTARA

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója

79-4064 — Szegedi Nyomda — F.v.: Dobó József igazgató

Technikai szerkesztő: Turchányi György — Műszaki szerkesztő: Marton Andor  
A kézirat nyomdába érkezett: 1979. VIII. 8. Terjedelem: 11,2 (A/5 ív)









Ára: 12,— Ft  
Előfizetés kötetenként: 72,— Ft

INDEX: 26491  
ISSN 0025—0104

## TARTALOMJEGYZÉK

### A KÉPLÉKENY ALAKÍTÁS VIZSGÁLATI MÓDSZEREI

Szerkesztette:  
Kovács István  
ELTE, Általános Fizika Tanszék

<i>Kovács István: Az egytengelyű nyújtás</i> .....	3
<i>Rajkovits Zsuzsa: Az összenyomás</i> .....	15
<i>Tóth László: A csavarás</i> .....	23
<i>Lendvai János: A kúszás</i> .....	37
<i>Tasnádi Péter: A feszültségrelaxáció</i> .....	51
<i>Vörös György: A képlékeny alakváltozás vizsgálata belsőúrlódás méréssel</i> .....	75
<i>Ungár Tamás: Alakított fémek vizsgálata röntgen vonalprofil analízissel</i> .....	85
<i>Juhász András: A keménységmérés</i> .....	93
<i>Honyek Gyula: A fárasztás</i> .....	105
<i>Sáray István: A törés vizsgálata</i> .....	117

307226

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

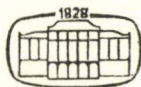
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR  
ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
PÁL LÉNÁRD

XXVIII. KÖTET

2. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1980



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klaszszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10-10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár  
Biofizikai Intézet  
1444 Budapest VIII. Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 72 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölik. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

# ÁLTALÁNOS MECHANIKAI RENDSZEREK GEOMETRIAI LEÍRÁSA

HORVÁTHY PÉTER  
Veszprémi Vegyipari Egyetem

A Lagrange-egyenletekhez vezető hagyományos eljárás kiegészítésével megadjuk a klasszikus mechanikai rendszerek egy koordinátamentes leírását, melyet aztán tovább terjesztünk bizonyos elektromágneses kölcsönhatásban álló és spines rendszerekre. Megvizsgáljuk Hamilton elvének geometriai megfogalmazását és bevezetünk egy, valamennyi általános mechanikai rendszerre érvényes lokális variációs formalizmust. Alkalmazásként megkonstruáljuk a spines részecske egy lokális Lagrange-függvényét, mely azonban nem globalizálható.

## TARTALOM

Tartalmi összefoglaló .....	127
Tartalom .....	127
Bevezetés .....	128
I. fejezet: Klasszikus rendszerek koordinátamentes leírása .....	129
I.1 Konfigurációs tér .....	129
I.2 Lagrange-egyenletek .....	131
I.3 Koordinátamentes alak .....	132
I.4 Klasszikus mechanikai rendszerek .....	135
I.5 Kritikai megjegyzések .....	136
II. fejezet: A koordinátamentes leírás kiterjesztése .....	137
II.1 Tér-idő leírás (geometriai aspektus) .....	137
II.2 Dinamikai leírás .....	139
II.3 Elektromágneses kölcsönhatás .....	143
II.4 Spines részecskék .....	145
II.5 A konzervatív rendszerek osztályának kibővítése: Maxwell-elv .....	148
II.6 Általános mechanikai rendszerek .....	149
III. fejezet: Hamilton elvének kiterjesztése .....	152
III.1 A statika és dinamika közti analógia .....	152
III.2 Hamilton elvének heurisztikus tárgyalása .....	154
III.3 A probléma geometrizálása .....	157
III.4 Általános variációs rendszerek .....	161
IV. fejezet: A két közelítési mód egybevetése .....	163
IV.1 Inverz probléma .....	163
IV.2 Példák .....	165
IV.3 Lokális variációs formalizmus spines részecskékre .....	166
Irodalom .....	168
<i>Függelék: Differenciálgeometriai összefoglaló (Úry László) .....</i>	<i>169</i>
A) Differenciál- és integrálszámítás sokaságokon .....	169
1. Sokaságok elemi tulajdonságai .....	169
2. Tangensnyaláb .....	170
3. Differenciálformák .....	171

\* Egyetemi doktori értekezés, 1978. Érkezett 1978. okt. 14.



4. Lie-szorzás és külső deriválás .....	173
5. Integrálás sokaságokon .....	175
6. Görbe menti integrálás .....	177
B) Fibrált sokaságok .....	178
C) A $d$ -operátor .....	179

## BEVEZETÉS

Az elméleti fizika számos ágában, elsősorban a relativitáselméletben, egyre nagyobb szerep jut a koordinátamentes, tömör leírást biztosító geometriai módszereknek. A fizika egysége csak úgy tartható fenn, ha az új eszközök, módszerek alkalmazását a klasszikus, már lezárt területekre is kiterjesztjük és a hagyományos kérdéseket az új eljárások segítségével egy magasabb szempontból vizsgáljuk. Dolgozatunk a klasszikus mechanika modern differenciálgeometriai eszközökkel történő újrafogalmazásával kapcsolatos.

Az elméleti fizika a jelenségek leírásához általában két irányból közelít: vagy a közvetlen tapasztalatokból leszűrt empirikus összefüggésekkel, egyenletekkel dolgozik, vagy — figyelembe véve a vizsgált diszciplína leírásának sajátosságait — egy általánosabb „elv”-ből kiindulva az egyenleteket ebből az elvből származtatja. Felépítésünk lehetővé teszi a két közelítési mód viszonyának vizsgálatát.

Első lépésben az  $n$ -test probléma kapcsán induktíve, a Newton-egyenletekből kiindulva a Lagrange-egyenletekhez vezető klasszikus eljárás [7] kiegészítésével eljutunk egy koordinátamentes leíráshoz, mely lényegében Mackey [17], Godbillon [6], Abraham [1] „szimplektikus mechanikájával” egyezik meg. Rámutatunk azonban arra, hogy ez a tárgyalás csak a klasszikus mechanikai rendszerek egy szűk osztályára érvényes, és így kívánatos a leírás kiterjesztése.

Második lépésként a leírást kiterjesztjük úgy, hogy fölöleljen bizonyos elektromágneses és spines kölcsönhatásokat is.

A harmadik fejezet tárgya Hamilton elvének geometriai megfogalmazása. Vizsgálataink vezérfonala a statika és dinamika közti analógia kiterjesztése lesz: a dinamika tételeit végtelen dimenziós sokaságok nyelvén interpretálva, azok pontos párhuzamba állíthatók a statika állításaival [9]. Hamilton elvét általánosítva bevezetjük a lokális variációs leírás fogalmát.

Dolgozatunk utolsó, negyedik fejezete a II. és III. fejezetben ismertetett „lokális”, azaz egyenletekkel való és „globális”, azaz Hamilton elvével történő fölépítésének viszonyát tisztázza. Itt mutatjuk be legfontosabb új eredményeinket is, melyek a spines részecskék variációs leírására vonatkoznak. A mechanika régi problémája ugyanis, vajon a spines részecskéket leíró Thomas-féle egyenletek [24] származtathatók-e variációs elvből. Első eredményünk szerint a spines részecskéknek nem lehet globálisan értelmezett Lagrange-függvénye. Második eredményünk azt állítja, hogy ennek ellenére lokális Lagrange-függvény létezik. Elő is állítjuk ezt a lokális Lagrange-függvényt, és megmutatjuk, hogy az nem globalizálható. Első eredményünk *Souriau* [20], [22] kvantálhatósági feltételekből származtatja: a jelek szerint ez a meglepő állítás a spin diszkrét voltával kapcsolatos. Második eredményünk abszolút értelemben is új [10].

Módszerünk általános eljárást ad annak eldöntésére, adott egyenletek mikor

származnak variációs elvből, és lehetőséget nyújt a Lagrange-függvény megkonstruálására.

A második és harmadik fejezet felépítése *Souriau* [20] és *Klein* [11], [12] tárgyalásával rokon; a kettőnek mintegy szintézise.

### KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönetet mondok *Dr. Bakos Miklós* egyetemi tanárnak (Veszprémi Vegyipari Egyetem Vegyipari Művelti Tanszék), aki lehetővé tette dolgozatom elkészítését; *Dr. Soós Gyula* (ELTE TTK Geometria Tanszék) és *Dr. Pócsik György* (ELTE TTK Elméleti Fizika Tanszék) professzoroknak, dolgozatom bírálóinak; *Dr. Sebestyén Ákos* tudományos munkatársnak (KFKI RMKI Elméleti Osztály) ösztönzéséért és állandó érdeklődéséért, valamint *Úry László* barátomnak (ELTE TTK Geometria Tanszék) akivel első cikkünket [9] írtuk, és a továbbiakban is számos kérdésben nyújtott hasznos segítséget. A dolgozatban fölhasznált matematikai eszközök rövid összefoglalásáért is *Úry Lászlónak* tartozom köszönettel.

## I. FEJEZET

### KLASSZIKUS RENDSZEREK KOORDINÁTAMENTES LEÍRÁSA

#### I.1 Konfigurációs tér

Tekintsünk  $n$  kölcsönhatásban álló tömegpontot. Az egyes részecskék helyzet rendre 3-3 térkoordináta,  $x_1, \dots, x_n$  ( $x_i \in R^3$ ) jellemzi. Bizonyos kölcsönhatásokat idealizálunk (merev rudak, súrlódás nélküli felületek, nem nyúló fonalak stb.) és geometriai feltételekkel helyettesítünk. A legegyszerűbb (holonom-szkleronom) esetben<sup>1</sup> ezek alakja:

$$f_j(x_1, \dots, x_n) = 0 \quad (j = 1, \dots, p < 3n) \quad (\text{I.1.1})$$

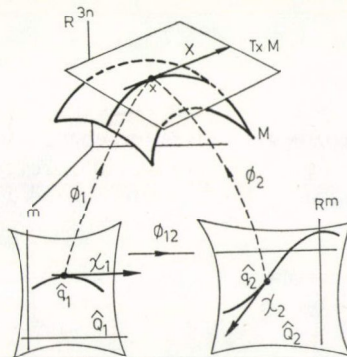
Az  $n$  test koordinátái együtt a  $3n$  dimenziós numerikus tér,  $R^{3n}$  egy pontját határozzák meg. Az I.1.1 feltételek fennállása következtében ez a pont nem az egész  $R^{3n}$ -ban, hanem annak csak egy  $M$   $3n-p$  dimenziós hiperfelületén mozoghat. (I.1.1 ábra)

A kölcsönhatásban résztvevő tömegpontokra érvényes a Newton-törvény:

$$m_i a_i = F_i + K_i \quad (i = 1, \dots, n), \quad (\text{I.1.2})$$

ahol  $F_i$  az  $i$ -edik testre ható szabaderő,  $K_i$  az I.1.1 feltételek fennállását biztosító kényszererő.

A szokásos megoldás alkalmával I.1.1-ből kifejezzük valamelyik  $p$  változót; az I.1.2-ből a kényszererők eliminálhatók; a maradék  $m = 3n - p$  változót tartalmazó  $3n - p$  egyenletet megoldjuk. Eljárásunk geometriai interpretációja: a  $p$  változó kiküszöbölése azt jelenti, hogy  $M$ -et kölcsönösen



I.1.1 ábra

<sup>1</sup> A geometriai leírás sokkal általánosabb esetben is lehetséges; lásd pl. *Gallissot* [5].



és egyértelműen megfeleltetjük  $R^m$  egy nyílt halmazának („független koordináták halmaza”) majd a mozgásegyenletet átírjuk erre a halmazra. A szóban forgó  $R^m$ -beli halmazt  $\hat{Q}$ -val jelölve mondhatjuk, hogy a  $\mathbf{p}$  „fölösleges” változó kiküszöbölésével egy  $\Phi: \hat{Q} \rightarrow M \subseteq R^{3n}$  leképezéshez jutunk.  $\hat{Q}$  egy pontját  $\hat{q} = (q^1, \dots, q^m)$ -mel jelölve írhatjuk:

$$\Phi(\hat{q}) = \begin{bmatrix} \Phi_1(\hat{q}) \\ \vdots \\ \Phi_{3n}(\hat{q}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{3n} \end{bmatrix} = x \in M. \quad (\text{I.1.3})$$

A  $\Phi$  kölcsönösen egyértelmű, kedvező esetben mindkét irányban differenciálható (ezt a következőkben mindig kikötjük).

A  $\hat{Q}$  halmaz és a  $\Phi$  leképezés nyilván a mi önkényes választásunktól függ. Egy  $(\hat{Q}, \Phi)$  párt ideiglenesen „térképnek” hívva mondhatjuk, hogy  $M$ -et különböző módon koordinátázva térképek egész kollekciójához jutunk. Ha  $(\hat{Q}_1, \Phi_1)$  és  $(\hat{Q}_2, \Phi_2)$  két ilyen térkép, akkor a  $\Phi_{12} := \Phi_2^{-1} \circ \Phi_1$  nyilván (lokális) diffeomorfizmus.

A koordinátázásból fakadó önkénnytől úgy szabadulhatunk meg, hogy az egyes térképek helyett az általuk meghatározott  $Q$  differenciálható sokaságot vizsgáljuk. Könnyen igazolható ugyanis, hogy bevezethető egy  $Q$  differenciálható sokaság, melynek atlasza olyan  $(\hat{Q}_i, \varphi_i)$  térképekből áll, ahol  $\hat{Q}_i$  épp a fenti, a  $\varphi_i: \hat{Q}_i \rightarrow \hat{Q}$  leképezések pedig kielégítik a  $\Phi_{ij} = \varphi_j \circ \varphi_i^{-1}$  összefüggéseket. (Ezért is hívhattuk az előzőekben a  $(\hat{Q}, \Phi)$  párokat is térképnek).

Az  $n$ -test problémánál a  $Q$  kölcsönösen egyértelmű kapcsolatba hozható  $M$ -mel, vagyis a rendszer egészének helyzetét képviselő pontok halmazával. Kézenfekvő így az általánosítás:

*Egy mechanikai rendszer helyzetei  $m$  dimenziós sokaságot<sup>1</sup> alkotnak; ezt hívjuk konfigurációs térnek.*

A rendszer mozgása során a helyzetet jellemző pont  $M$ -ben mozog. Az egyes  $\Phi$ -k ezt a pontot leviszik a térképekre, és így a térképeken fekvő differenciálható görbékhez jutunk. A  $Q$  sokaság konstrukciója következtében ezek valamennyien egyetlen, immár a  $Q$ -ban fekvő görbe reprezentánsai lesznek.

*A rendszer mozgásainak trajektóriái a  $Q$  konfigurációs térben fekvő görbék.*

Célunk a mozgás-trajektóriák koordinátamentes leírása. Az erre szolgáló eszközöket az egyes térképeken érvényes „általános koordinátás” leírásból olvassuk ki. Hogy a minket érdeklő észrevételeket megtehessük, röviden átvesszük a Lagrange-egyenletekhez vezető klasszikus eljárást [7].

<sup>1</sup> Itt és a továbbiakban a differenciálható jelzőt elhagyjuk. Minden leképezés eleve  $C^\infty$ -értelmenben differenciálható lesz.

## I.2 Lagrange-egyenletek

A mozgásegyenletek térképbeli kifejezéséhez a virtuális munka elvének felhasználásával juthatunk, mely lényegében az I.1.1 kényszerfeltételek ideális voltát tartalmazó hipotézis.

Egy „virtuális elmozdulás” az  $M \subseteq R^{3n}$  hiperfelület egy adott pontbeli érintő-hipersíkjának egy vektora („a kényszerrel kompatibilis infinitezimális elmozdulás”). Az  $[X_1^*, \dots, X_n^*]^* \in R^{3n}$  virtuális elmozdulás-vektornak a kiszemelt  $(Q, \Phi)$  térképen a  $[\chi] = [\chi^1, \dots, \chi^m]^* \in R^m$  vektor, sokaság-fogalmazásban az  $X \in T_q Q$  tangens-vektor felel meg.

A virtuális munka elve azt állítja, hogy a kényszererők virtuális munkája tetszőleges virtuális elmozdulás esetén zérus:

$$\sum_{i=1}^n (K_i X_i) = 0. \quad (\text{I.2.1})$$

Ekkor az I.1.2 Newton-egyenletek ekvivalensek a következővel:

$$\sum_{i=1}^n (m_i a_i X_i) = \sum_{i=1}^n (F_i X_i). \quad (\text{I.2.2})$$

A  $\Phi: \hat{Q} \rightarrow M$  leképezés derivált leképezése minden  $\hat{q} \in \hat{Q}$  pontban lineáris diffeomorfizmus  $R^m$  és  $M \subseteq R^{3n}$   $x = \Phi(\hat{q})$ -beli érintő-hipersíkja között. Így  $[X_1^*, \dots, X_n^*]^* \in R^{3n}$  is előáll

$$[X_1^*, \dots, X_n^*]^* = [D\Phi_{\hat{q}}][\chi^1, \dots, \chi^m]^* \quad (\text{I.2.3})$$

alakban, ahol  $[D\Phi_{\hat{q}}]$  a  $D\Phi_{\hat{q}}$  lineáris leképezés mátrixa.

Vizsgáljuk először I.2.2 jobb oldalát! Az

$$[F] := [\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_m] := [F_1^*, \dots, F_n^*][D\Phi_{\hat{q}}] \quad (\text{I.2.4})$$

sormátrix az általánosított erő. Ezzel a jobb oldal

$$[F][\chi] = [\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_m][\chi^1, \dots, \chi^m]^* \quad (\text{I.2.5})$$

éppen a szabaderők virtuális munkája a  $\hat{Q}$  adataival fölrírva.

A bal oldal átalakításához vezessük be a következő mátrixot:

$$[I_{\hat{q}}] = [D\Phi_{\hat{q}}]^* \begin{bmatrix} m_1 & & & \\ & m_1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & m_n \\ & & & & m_n \\ & & & & & m_n \end{bmatrix} [D\Phi_{\hat{q}}] \quad (\text{I.2.6})$$

Ez a rendszer kinetikus mátrixa. Az elnevezés oka, hogy a rendszer kinetikus energiája ekkor a  $\hat{T}: \hat{Q} \times R^m \rightarrow R$  függvénnyel adható meg.  $\hat{Q} \times R^m$  egy pontját  $(\hat{q}, \hat{v})$ -vel jelölve a kinetikus energia:

$$\hat{T}(\hat{q}, \hat{v}) = 1/2 [\hat{v}]^* [T_{\hat{q}}] [\hat{v}]. \quad (\text{I.2.7})$$



Ezután a szokásos átalakítással (lásd pl. Goldstein [7]) a bal oldal

$$\sum_{\alpha=1}^m \left\{ \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \hat{T}}{\partial \dot{v}^\alpha} \right) - \frac{\partial \hat{T}}{\partial \dot{q}^\alpha} \right\} \chi^\alpha. \quad (\text{I.2.8})$$

Innen figyelembe véve, hogy egy  $R^m$ -beli vektor csak akkor lehet minden vektorra ortogonális, ha 0, a nem konzervatív Lagrange-egyenletekhez juthatunk:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \hat{T}}{\partial \dot{v}^\alpha} \right) - \frac{\partial \hat{T}}{\partial \dot{q}^\alpha} = \mathcal{F}_\alpha \quad \alpha = 1, \dots, m. \quad (\text{I.2.9})$$

### I.3 Koordinátamentes alak

Az I.2.5 formulát szemügyre véve megállapítható, hogy míg az általánosított erő és virtuális elmozdulás mátrix-representánsai a koordinátarendszer választásától függenek, addig szorzatuk — a virtuális munka — már független a térképezéstől. Kézenfekvő tehát az erőt egy, a  $Q$  sokaságon adott *kovektornak* tekinteni. A következőkben mindig fölteszük, hogy nem egyetlen pontban ható erőkkkel, hanem erőterekkel van dolgunk; az erőtér geometriai megfelelője egy *kovektor-mező*, vagyis *1-forma*. (Szokásos a *Pfaff-forma* elnevezés is). Az erő-forma koordinátáit éppen az I.2.5 kifejezés definiálja. Az erő-forma értéke egy  $q$  pontban az  $X \in T_q Q$  tangensvektoron:

$$F(X) := \sum_{\alpha=1}^m \mathcal{F}_\alpha(q) \chi^\alpha. \quad (\text{I.3.1})$$

Lokálisan írható tehát, hogy

$$F = \sum_{\alpha=1}^m \mathcal{F}_\alpha dq^\alpha. \quad (\text{I.3.2})$$

Az  $\mathcal{F}_\alpha$  együttható-függvények itt differenciálható függvények  $Q$ -n.

Hasonlóan, az I.1.7 egy, a  $Q$ -n definiált szimmetrikus tenzormező mátrix-representánsa. A tenzor értéke az  $X, Y \in T_q Q$  érintővektorokon:

$$T_q(X, Y) = [\chi]^* [T_q] [\eta], \quad (\text{I.3.3})$$

ahol  $[\chi]$  és  $[\eta]$  a két érintővektor mátrix-representánsa egy választott térképen.

Az I.2.6 mátrix a származtatás következtében reguláris, és így a  $T$  tenzor pozitív definit.

A  $\hat{Q} \times R^m$  halmazok a  $TQ$  egy atlaszát alkotják, ha  $\hat{Q}$  végigfut  $Q$  egy atlaszán. A kinetikus energia I.2.7 kifejezése egy, a  $TQ$ -n adott valós függvényt definiál. A félreértés veszélye nélkül írhatjuk:

$$T(q, v) = 1/2 T_q(v, v) = \hat{T}(\hat{q}, \hat{v}). \quad (\text{I.3.4})$$

A Lagrange-egyenletek helyes értelmezéséhez azt kell meggondolnunk, hogy azok — kiegészítve a  $d\hat{q}/dt = \hat{v}$  összefüggésekkel — a  $\hat{Q} \times R^m \subseteq R^{2m}$  halmazon értelmezett implicit elsőrendű egyenletek. A megoldásgörbék — melyek egzisztenciáját és unicitását a közönséges differenciálegyenletek standard tételei biztosítják — a  $\hat{Q}$ -ra vetítve nyerjük a mozgások trajektóriáinak  $\hat{Q}$ -beli representánsait. A mozgásgörbék

tehát úgy határozzuk meg, hogy előbb kilépünk egy magasabb dimenziós térbe, majd a kapott objektumokat — a jelen esetben görbéket — visszavetítjük a konfigurációs térre. Hasonló utat követünk a koordinátamentes felfogásnál is.

A  $TQ$   $2m$  dimenziós sokaság a rendszer *fázistere*. Ha  $g: t \rightarrow g(t)$  egy mozgás-trajektória, akkor ezen mozgásgörbe fázistérbeli „felhúzottja”:

$$\tilde{g}: t \rightarrow \left( g(t), \frac{dg}{dt}(t) \right) \in TQ. \quad (I.3.5)$$

A mozgás-trajektóriák felhúzottjait *állapotfejlődési görbéknek* hívjuk.

Tekintve, hogy egy kezdeti hely—sebesség pár megadása a mozgást már teljesen meghatározza, a  $TQ$  minden pontján át pontosan egy állapotfejlődési görbe halad. Így a  $TQ$  pontjait jogos a rendszer *állapotaival* azonosítani.

Az állapotfejlődési görbéket koordinátamentes nyelven leíró objektumokat keressük.

Az általánosított erő I.3.2 szerint egy kovektor-mező  $Q$ -n; beágyazva ezt a  $TQ$  kovektormezei közé egy  $TQ$ -n adott *félbázikus formához* jutunk. Az I.3.2 lokális alak most is helyes; az  $\mathcal{F}_\alpha$  együttható-függvények ezután még a sebességtől is függhetnek. I.3.4 maga is már a  $TQ$ -n értelmezett valós függvény.

A Lagrange-egyenletekhez vezető I.2.9 formulát szeretnénk egy  $TQ$ -n definiált differenciálforma térképbeli reprezentációjának tekinteni (erre a  $\chi^x$ -ktől való lineáris függés ad indítékot). Ekkor a Lagrange-egyenleteket  $\dot{Q} \times R^m$ -en értelmezett elsőrendű egyenletté kiegészítő  $d\dot{q}^x/dt = \hat{v}^x$  összefüggéseknek ugyanezen differenciálforma második  $m$  komponenséből kell származniuk. Tekintve, hogy I.2.9 a  $dq$ -komponens, kézenfekvő, hogy a másik  $m$  egyenlet a  $d\dot{q}$ -komponensből jön.

Szorozzuk meg  $d\dot{q}/dt = \hat{v}$ -t a nem szinguláris

$$(-1) \left[ \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \hat{v}^\alpha \partial \hat{v}^\beta} \right] \quad (I.3.6)$$

mátrixszal, majd képezzük a

$$-\sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \hat{v}^\alpha \partial \hat{v}^\beta} \frac{d\dot{q}^\alpha}{dt} dv^\beta = -\sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \hat{v}^\alpha \partial \hat{v}^\beta} \hat{v}^\alpha dv^\beta \quad (I.3.7)$$

differenciálformákat. Adjuk hozzá ezekhez az I.2.2 jobb és bal oldalát. Így néhány elemi átalakítás után kapjuk:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha, \beta} \left\{ \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \dot{q}^\alpha \partial \hat{v}^\beta} \frac{d\dot{q}^\alpha}{dt} dq^\beta - \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \dot{q}^\alpha \partial \hat{v}^\beta} \frac{d\dot{q}^\beta}{dt} dq^\alpha \right\} + \\ & + \sum_{\alpha, \beta} \left\{ \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \hat{v}^\alpha \partial \hat{v}^\beta} \frac{d\hat{v}^\alpha}{dt} dq^\beta - \frac{\partial^2 T}{\partial \hat{v}^\alpha \partial \hat{v}^\beta} \frac{d\dot{q}^\alpha}{dt} dv^\beta \right\} = \\ & = \sum_{\beta} - \left\{ \frac{\partial \hat{T}}{\partial \dot{q}^\beta} dq^\beta + \frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{v}^\beta} dv^\beta \right\} + \sum_{\beta} \mathcal{F}_\beta dq^\beta. \end{aligned} \quad (I.3.8)$$

Ránézésre ez a formula bonyolult; azonnal kiolvasható azonban belőle, hogy a jobb oldal éppen

$$-dT + F \quad (I.3.9)$$



térképbeli alakja, a bal oldal pedig egy  $2\mathbf{m} \times 2\mathbf{m}$ -es mátrixból jön:

$$[\mathfrak{g}] = \left[ \begin{array}{c|c} \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \dot{q}^\alpha \partial \dot{v}^\beta} - \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \dot{q}^\beta \partial \dot{v}^\alpha} & \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \dot{v}^\alpha \partial \dot{v}^\beta} \\ \hline -\frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \dot{v}^\alpha \partial \dot{v}^\beta} & 0 \end{array} \right] \quad (\text{I.3.10})$$

mégpedig

$$\left[ \frac{d(\dot{q}, \dot{v})}{dt} \right]^* [\mathfrak{g}] \quad (\text{I.3.11})$$

alakban. A következőkben a „kalapokat” („ $\wedge$ ”) elhagyjuk.

Vegyük szemügyre az I.3.10 mátrixot! Ez egy antiszimmetrikus tenzormező, azaz 2-forma mátrixa. A 2-forma lokális alakja:

$$\mathfrak{g} = \sum_{\alpha, \beta} \left\{ \frac{\partial^2 T}{\partial q^\alpha \partial v^\beta} dq^\alpha \wedge dv^\beta + \frac{\partial^2 T}{\partial v^\alpha \partial v^\beta} dv^\alpha \wedge dv^\beta \right\}. \quad (\text{I.3.12})$$

A külső formák számolási szabályai szerint átalakítva

$$\begin{aligned} \mathfrak{g} &= \sum_{\alpha, \beta} \left\{ \frac{\partial}{\partial q^\alpha} \left( \frac{\partial T}{\partial v^\beta} \right) dq^\alpha + \frac{\partial}{\partial v^\alpha} \left( \frac{\partial T}{\partial v^\beta} \right) dv^\alpha \right\} \wedge dq^\beta = \\ &= \sum_{\beta} d \left( \frac{\partial T}{\partial v^\beta} \right) \wedge dq^\beta = d \left\{ \sum_{\beta} \frac{\partial T}{\partial v^\beta} dq^\beta \right\}. \end{aligned} \quad (\text{I.3.13})$$

Vagyis a  $\mathfrak{g}$  külső deriváltja a lokálisan

$$\lambda = \sum_{\beta} \frac{\partial T}{\partial v^\beta} dq^\beta \quad (\text{I.3.14})$$

alakban adott 1-formának.

Ez az 1-forma viszont újra nevezetes alakú. A  $TQ$  egy sokaság érintőnyalábja, így bevezethető rajta a  $d$  „vertikális”- vagy „fibrum-deriválás”-nak hívott művelet (lásd a Függelékét). A  $\lambda$  éppen a kinetikus energia I.2.7 kifejezésének  $d$ -deriváltja:

$$\lambda = dT. \quad (\text{I.3.15})$$

Mint a későbbiekben látni fogjuk, a  $d$ -deriválás művelete fontos szerepet fog játszani a mechanika megfogalmazásában. Koordinátamentes alakban tehát a (nem konzervatív) Lagrange-egyenletek:

$$\mathbf{X} \lrcorner \mathfrak{g} = -d\mathbf{T} + \mathbf{F}, \quad (\text{I.3.16})$$

ahol a  $\mathfrak{g}$  antiszimmetrikus tenzormező, a rendszer *fundamentális tenzora* (Godbillon [6]) előáll

$$\mathfrak{g} = d\dot{\mathbf{T}} \quad (\text{I.3.17})$$

alakban.

Eredményeinket logikusan általánosítva a klasszikus mechanikai rendszerek következő — Godbillon által posztulált — megadási módjához jutunk.

## I.4 Klasszikus mechanikai rendszerek

### I.4.1 Definíció

Egy klasszikus mechanikai rendszert egy  $(Q, T, F)$  hármas jellemez, ahol

- $Q$  a konfigurációs tér; véges dimenziós sokaság;
- $T$  a kinetikus tenzor; szimmetrikus reguláris tenzormező  $Q$ -n;
- $F$  erőter; félbázikus 1-formamező  $TQ$ -n.

A mozgások trajektóriái az I.3.16 megoldásaiként előálló állapotfejlődési görbék  $Q$ -ra való vetületei. A  $\mathfrak{g}$  fundamentális forma I.3.17-ből számítható; az I.3.16 egyenletek tetszőleges térképen az I.2.9 nem konzervatív Lagrange-egyenleteket adják vissza. Poincaré tétele szerint

$$d\mathfrak{g} = 0. \quad (\text{I.4.1})$$

A  $d$ -deriválás tulajdonságainak ismeretében az is megmutatható, hogy

$$d\mathfrak{g} = 0. \quad (\text{I.4.2})$$

I.4.1 szerint, tekintve, hogy a  $\mathfrak{g}$  feltételeink szerint reguláris, a  $\mathfrak{g}$  *szimplektikus forma*. Innen a szimplektikus mechanika elnevezés.

Az I.4.1 Definíció szerint klasszikus mechanikai rendszerekre könnyen bizonyítható néhány szokásos tétel.

### I.4.2 Állítás (munkatétel)

Ha a rendszer a  $t_1$  és  $t_2$  időpontok közt a  $g$  görbe mentén mozgott, akkor

$$\int_{\tilde{g}} F = T(\tilde{g}(t_2)) - T(\tilde{g}(t_1)). \quad (\text{I.4.3})$$

A rendszert akkor tekintik (szűkebb értelemben) konzervatívnak, ha  $F = -dV$  alakú, ahol  $V: Q \rightarrow R$  függvény. (Klasszikusan ekkor bármely térképen  $\mathcal{F} = -\text{grad } U$ ). A rendszer tágabb értelemben konzervatív, ha  $dF = 0$  (vagyis ha  $\text{rot } \mathcal{F} = 0$ ). (A két fogalom ekvivalens, ha pl. a  $Q$  egyszerűen összefüggő).

Konzervatív esetben bevezethető az *energia*:

$$E = T + V, \quad (\text{I.4.4})$$

mely újra a  $TQ$ -n értelmezett függvény. Ekkor I.3.16 átmegy

$$X \lrcorner \mathfrak{g} = -dE \quad (\text{I.4.5})$$

alakba.

Az I.4.3 formulába helyettesítve kapjuk a mechanikai energia megmaradásának tételét:

### I.4.3 Állítás (energiatétel)

Ha a  $(Q, T, F)$  rendszer konzervatív, akkor az I.4.2 jelöléseivel

$$V(g(t_1)) + T(\tilde{g}(t_1)) = V(g(t_2)) + T(\tilde{g}(t_2)). \quad (\text{I.4.6})$$

Valóban, hiszen ilyenkor

$$\int_{\tilde{g}} F = -(V(g(t_2)) - V(g(t_1))).$$



Konzervatív rendszereknél kapjuk a Lagrange-egyenletek szokásos alakját:  $L=T-V$  a Lagrange-függvény, és I.4.5 lokálisan

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial v^\alpha} \right) - \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} = 0 \quad \alpha = 1, \dots, m \quad (\text{I.4.7})$$

mint megszoktuk.

Részletezés nélkül megemlítjük, hogy konzervatív rendszerek esetén áttérhetünk az állapotok  $TQ$ -val való jellemzéséről a  $T^*Q$ -val történő impulzus-fázistérre ( $T^*Q$  a  $Q$  kotangensnyalábja). Az áttérést a  $\lambda = dT$  forma teszi lehetővé (lásd pl. Godbillon [6], Abraham [1]). A  $\lambda$  forma indukálta  $L: TQ \rightarrow T^*Q$  Legendre-transzformáció a  $\mathfrak{g}$  fundamentális formát kanonikus alakúba viszi át:

$$[(L)_+(\mathfrak{g})] = [\omega] = \begin{bmatrix} & & 1 & 0 \\ & 0 & 1 \\ & & 0 & 1 \\ -1 & & 0 & \\ & -1 & 0 & \\ 0 & -1 & & \end{bmatrix}, \quad Y = DL(X). \quad (\text{I.4.8})$$

Az I.4.5 egyenlet ekkor a  $H := E \circ L^{-1}$  Hamilton-függvény bevezetésével a kanonikus Hamilton-féle alakot ölti:

$$Y \lrcorner \omega = -dH \quad (\text{I.4.9})$$

(lokális koordinátákban a Hamilton-egyenleteket kapjuk innen).

## I.5 Kritikai megjegyzések

Az előzőekben ismertetett szimplektikus mechanikai fölépítéssel több okból is elégedetlenek lehetünk.

1. A formalizmus nem alkalmas explicit időfüggő rendszerek leírására.
  2. Az energia, Lagrange- és Hamilton-függvény csak konzervatív esetben volt bevezethető. Ez az osztály pedig meglehetősen szűk: nem tartalmazza például az elektromágneses térben mozgó töltött részecskéket. Kíváncsú lenne tehát a konzervatív rendszerek osztályának ésszerű kibővítése.
  3. A formalizmust ki akarjuk terjeszteni spines részecskékre is.
  4. Az előzőekben csak a mozgásegyenletek koordinátamentes felírásával foglalkoztunk. Kérdés, hogy viszonylanak eredményeink a variációs leíráshoz?
  5. A modern fizika számos ágában fontos szerep jut a tér-idő szimmetriák vizsgálatának. Az előbbi felépítés a Galilei-csoport idő-paraméterének fellépése miatt nem alkalmas ezen kérdések természetes vizsgálatára.
- Dolgozatunk további részében ezen kérdések egy részének vizsgálatával foglalkozunk. A Hamilton-féle formalizmusra — bár könnyen adódna — nem térünk ki; a tér-idő szimmetriák tárgyalása pedig már egy másik disszertáció témája lehetne; így itt ezzel sem foglalkozhatunk.

## II. FEJEZET

## A KOORDINÁTAMENTES LEÍRÁS KITERJESZTÉSE

Az I. fejezet végén fölvetett problémák megoldásához több, lényegében ekvivalens úton is eljuthatunk. Az explicit időfüggés figyelembevételére az tűnne a leg-egyszerűbbnek, ha az állapotok halmazát,  $TQ$ -t kibővítenénk az idővel, és a  $TQ \times R$  „evolúciós téren” (Souriau [20]) dolgoznánk. Ez a felfogás viszont a tér és idő szerepének éles szétválasztásával jár, így természetesebb, ha magát a konfigurációs teret,  $Q$ -t bővítjük ki az idővel, és a közvetlen fizikai realitást képviselő tér-időn,  $Q \times R$ -en dolgozunk. A mozgások trajektóriái helyett azok gráfjait, a világvonalakat fogjuk vizsgálni.

Elsőnek a tér-időre való áttérés geometriai következményeit tekintjük át. A dinamikai leírás formalizmusát az I. fejezetben bevezetett eszközök „fölcsempészésével” keressük meg, majd kiterjesztjük bizonyos elektromágneses és spines rendszerekre is. Az I. fejezet korlátozó feltevéseitől úgy szabadulunk meg, hogy a konzervatív rendszerek osztályát kibővítjük, mégpedig oly módon, hogy a fenti rendszerek is beleférjenek. Végezetül összefoglaljuk az általános mechanikai rendszerek tulajdonságait.

## II.1 Tér-idő leírás (geometriai aspektus)

Legyen  $(Q, T, F)$  egy klasszikus mechanikai rendszer; ekkor a rendszer *tér-ideje*:  $Q \times R$ . A tér-idő pontjai lokálisan  $x = (q, t)$  alakban írhatók,  $q \in Q$ ,  $t \in R$ . Ha  $Q$   $n$ -dimenziós, a tér-idő  $n + 1$  dimenziós sokaság lesz.

Legyen  $g$  egy mozgás trajektóriája. A  $g$ -hez tartozó *világvonal* matematikailag a  $g$  gráfja:

$$h := \{(g(t), t) : t \in R\} \subseteq Q \times R. \quad (\text{II.1.1})$$

A világvonalak tetszőleges olyan paraméterezése megengedett, melynél az időkomponens a paraméter szigorúan monoton függvénye:

$$\tau \rightarrow h(\tau) = (h_q(\tau), h_t(\tau)) \in Q \times R, \quad (\text{II.1.2})$$

ahol  $dh_t/d\tau > 0$ .

Hogy a mozgásokat leírassuk, az I. fejezetben a konfigurációs térből átléptünk a fázistérbe, melyet a rendszer állapotainak halmazával azonosítottunk. Az analóg eljárás most a  $T(Q \times R)$  halmaz pontjaihoz vezet.  $T(Q \times R)$  pontjai lokálisan  $y = (x, \dot{x}) = (q, t, \dot{q}, \dot{t})$  alakban írhatók.

Ha egy világvonalat fölhúzunk  $T(Q \times R)$ -be, a paraméterezéstől függően más és más görbéhez jutunk. A  $\tau$  paraméter szerinti fölhúzott legyen

$$\tilde{h}^\tau := \left( h, \frac{dh}{d\tau} \right). \quad (\text{II.1.3})$$

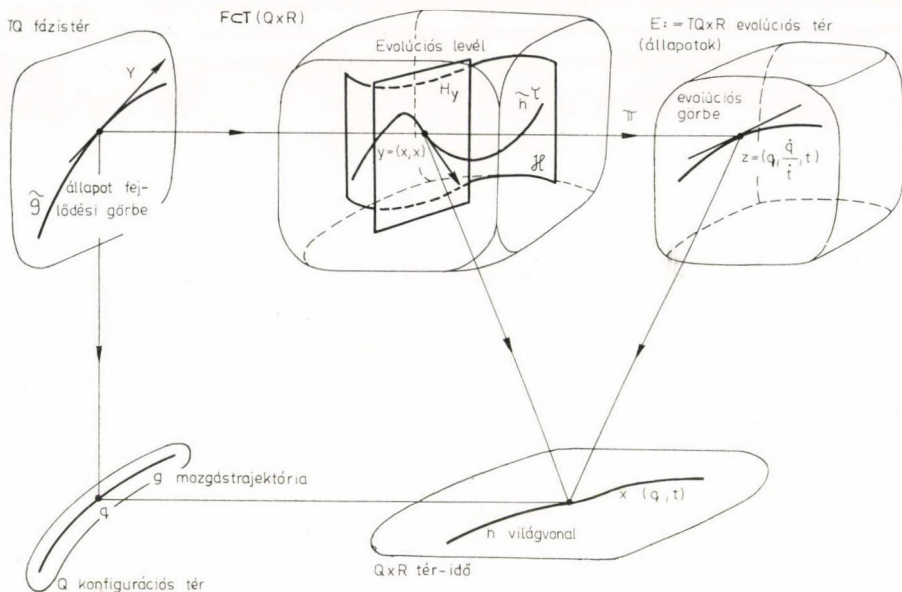
Az összes lehetséges világvonalat a II.3.1 szerint fölhúzva a  $T(Q \times R)$  egy nyílt  $F$  részhalmazához jutunk:

$$F := \{(q, t, \dot{q}, \dot{t}) \in T(Q \times R) : \dot{t} > 0\} \quad (\text{II.1.4})$$



(a situációt a II.1.1. ábra tünteti föl).  $F$  — akárcsak a  $T(Q \times R)$  —  $2n+2$  dimenziós sokaság. Ugyanazon világvonal különböző paraméterek szerinti fölhúzottjait összehasonlítva megállapítható, hogy

$$dh_q/d\tau: dh_t/d\tau = dg/dt. \quad (\text{II.1.5})$$



II.1.1. ábra

Közvetlen fizikai jelentése tehát csak a  $\dot{q}/\dot{t}$  hányadosnak van. Az  $y_1=(x_1, \dot{x}_1)$  és  $y_2=(x_2, \dot{x}_2)$   $F$ -beli pontok *ekvivalensek*, ha

$$x_1 = x_2 \text{ és van olyan } \lambda > 0, \text{ hogy } \dot{x}_1 = \lambda \dot{x}_2.$$

Szóhasználatunkkal egy világvonal ugyanazon  $(q, t)=x$  „fölkötő” fölhúzottjai fizikailag ekvivalensek. Tekintve, hogy egy hely—idő—sebesség hármass az explicit időfüggő rendszerek mozgását is meghatározza,  $F$  két pontja akkor képviseli ugyanazt az állapotot, ha ekvivalens egymással. Más fogalmazásban: ha a fizikai ekvivalencia relációját  $\sim$  jelöli, akkor az *állapotok halmaza*

$$E := F/\sim$$

az  $F \sim$ -szerinti faktorsokasága.  $E$  Souriau *evolúciós terével*,  $TQ \times R$ -rel azonosítható.  $E$   $2n+1$  dimenziós sokaság. Egy világvonal összes lehetséges felhúzottja a  $\Pi: F \rightarrow E$  kanonikus projekciónál  $E$  egy (szigorúan monoton időkomponensű) görbéjébe, az *evolúciós görbébe* megy át (lásd a II.1.1. ábrát).

Minket azonban nem az egyes — a paraméter önkényes választásától is függő — fölhúzottak érdekelnek; valamilyen értelemben mindet egyszerre akarjuk vizsgálni. Erre a következő állítás ad lehetőséget:

### II.1.1 Tétel

Legyen  $h$  tetszőleges világvonal. Ekkor

i)  $h$  összes megengedett paraméter szerinti fölhúzottja  $F$  egy 2 dimenziós részsokaságát burkolja, melyet a továbbiakban *evolúciós levélnek* hívunk, és  $\mathcal{H}$ -val jelölünk.

ii)  $\mathcal{H}$  úgy is jellemezhető, hogy

$$\mathcal{H} = \{y \in F: y \sim h^*(q) \exists q \in R\}.$$

iii) a világvonalak, evolúciós levelek és evolúciós görbék kapcsolata kölcsönösen egyértelmű.

iv)  $F$  minden pontján át pontosan egy evolúciós levél halad;  $E$  minden pontján át pontosan egy evolúciós görbe halad.

### Bizonyítás

i) Tekintsük a  $t \rightarrow g(t)$  mozgáshoz tartozó világvonalat. Ekkor egy alkalmas  $I \subseteq R$  intervallummal az ehhez tartozó evolúciós levél egy térképe megadható a következő alakban:

$$\Phi: I \times R^+ \ni (u, v) \rightarrow (g(u), u, (dg/dt)(u) \cdot v, v) \quad (\text{II.1.6})$$

$\Phi: I \times R^+$ -at beágyazza  $F$ -be; az ilyen térképek  $\mathcal{H}$  egy atlaszát alkotják.

ii) és iii) triviális; iv) az állapotfogalomból következik. q. e. d.

A fentieket a klasszikus rendszerek geometriai tulajdonságaiból származtattuk. A II.4-ben hasonló felépítést adunk majd a spines részecskékre is. Előbb azonban a dinamikai leírás eszközeivel foglalkozunk.

## II.2 Dinamikai leírás

Az állapotfejlődési görbéket dinamikailag az I.3.16 „koordinátamentes Lagrange-egyenletek” írják le. Megoldásuk a görbék érintőikből való rekonstrukcióját jelentette. Az előző pontban megváltoztattuk a geometriai apparátust. Kérdés, hogyan változnak a dinamikát leíró objektumok?

Motivációként gondoljuk meg, hogy most nem maguknak az érintőknek, hanem az evolúciós levelek egész érintőterének van közvetlen jelentése. Ha tehát sikerül valahogy koordinátamentes alakban az érintőtereket előállítanunk, utána a fibrált terek elmélete segítségével az evolúciós levelek rekonstruálhatók lesznek Frobenius tétele szerint (lásd a Függelékét).



Az érintőterek szóban forgó koordinátamentes előállítására céljából vegyük szemügyre I.3.16 következő átrendezett alakját:

$$X \lrcorner \vartheta + dT = F. \quad (\text{II.2.1})$$

A bal oldal a kinetikus tenzorral kapcsolatban álló inhomogén kifejezés. Az első tag a  $T: TQ \rightarrow R$  függvényből képzett  $d\dot{T} = \vartheta$  2-forma kontraháltja az  $X$   $TQ$  fölötti vektormező szerint, a második tag a magában álló  $dT$ . Az  $X$  azonban csak hely—sebesség koordinátát tartalmaz. Sejthető tehát, hogy új formalizmusunkban a második tag egy idő-komponenssel való kontrahálásból fog származni. Valóban, eredményeinket előrebecsátva kimondjuk:

**II.2.1 Tétel** (kiterjesztési lemma). Legyen a  $(Q, T, F)$  rendszer konzervatív. Vezessük be a következő homogenizált mennyiségeket:

$$\text{i)} \quad \tau(q, t, \dot{q}, i) := T \left( q, \frac{\dot{q}}{i} \right) i$$

homogenizált kinetikus energia

$$\text{ii)} \quad \theta := d\dot{\tau}$$

inercia-forma

$$\text{iii)} \quad \Phi := F \wedge dt$$

erő-forma

$$\text{iv)} \quad \Sigma := \theta - \Phi$$

Lagrange-forma

ekkor az evolúciós levelek az

$$y \rightarrow H_y := \text{Ker } \Sigma_y := \{X \in T_y F : X \lrcorner \Sigma_y = 0\} \quad (\text{II.2.2})$$

integrálható altérmező integrálsokaságai.

A paragrafus célja ezen alapvető tétel bizonyítása, melyet több lépésben fogunk megtenni.

Tekintsünk egy  $(Q, F, T)$  klasszikus rendszert; legyen  $Q \times R$  a rendszer tér-ideje. Az I. fejezetben bevezetett állapotfejlődési görbék és az előző pont evolúciós levelei kölcsönösen egyértelmű kapcsolatban állnak egymással. Ennek megfelelően, kölcsönösen egyértelmű lesz a kapcsolat az állapotfejlődési görbék érintővektorai és az evolúciós levelek érintőterei között:

## II.2.2 Állítás

Legyen  $y \in F$  tetszőleges pont (lokálisan  $y = (q, t, \dot{q}, i)$ ). Jelölje az  $y$ -on átmenő evolúciós levelet  $\mathcal{H}$ , legyen  $\mathbf{g}$  a megfelelő mozgás-trajektória. A  $\mathcal{H}$   $y$ -beli érintőtere,  $H_y$  (mely a  $T_y F$  2 dimenziós altere) ekkor így jellemezhető:

$$H_y = \left\{ (X_q, X_t, X_{\dot{q}}, X_i) : \left( \frac{X_q}{X_t}, \frac{1}{X_t} \left( \frac{X_{\dot{q}}}{i} - \frac{\dot{q}}{i} \frac{X_i}{i} \right) \right) = d\tilde{g}/dt \right\}. \quad (\text{II.2.3})$$

*Bizonyítás*

A II.1.1 Tétel bizonyításában szereplő II.1.6 formula szerint  $y$  egy környezetében  $\mathcal{H}$  egy térképe megadható egy  $\Phi$  leképezéssel, melyre  $y = \Phi(u, v)$ . De ekkor  $X \in H_y$  pontosan akkor teljesül, ha van olyan  $U, V \in R$ , melyre

$$\begin{bmatrix} X_q \\ X_t \\ X_{\dot{q}} \\ X_{\dot{t}} \end{bmatrix} = [D\Phi_{(u,v)}] \begin{bmatrix} U \\ V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{dg}{dt}(u) \cdot U \\ U \\ \frac{d^2g}{dt^2}(u) \cdot v \cdot U + \frac{dg}{dt}(u) \cdot V \\ V \end{bmatrix}. \quad (\text{II.2.4})$$

Ha tehát  $X \in H_y$ , akkor II.2.4 szerint — mint az rövid számolással igazolható — II.2.3 jobb oldala teljesül.

Visszafelé, II.2.3 jobb oldalának egy elemére  $u=t$ ,  $v=i$ ,  $U=X_t$ ,  $V=X_{\dot{t}}$  választással II.2.4 adódik. q. e. d.

Az I.3.16 formulába való helyettesítéssel most már megkereshető a tér-idő leíráshoz alkalmas formalizmus. Legyen

$$Y := D\Pi_y(X) = \left( \frac{X_q}{X_t}, \frac{1}{X_t} \left( \frac{X_{\dot{q}}}{\dot{t}} - \frac{X_{\dot{t}}}{\dot{t}} \frac{\dot{q}}{\dot{t}} \right) \right).$$

Ha  $X$  érinti az evolúciós levelet, akkor II.2.3 szerint  $Y$  ki kell, hogy elégítse I.3.16-ot. Ez lokálisan azt jelenti, hogy

$$\sum_{\beta} \left\{ \sum_{\alpha} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial q^{\alpha} \partial v^{\beta}} - \frac{\partial^2 T}{\partial q^{\beta} \partial v^{\alpha}} \right) \frac{X_q^{\alpha}}{X_t} + \sum_{\alpha} \frac{\partial^2 T}{\partial v^{\alpha} \partial v^{\beta}} \frac{1}{X_t} \left( \frac{X_{\dot{q}}^{\alpha}}{\dot{t}} - \frac{X_{\dot{t}}}{\dot{t}} \frac{\dot{q}^{\alpha}}{\dot{t}} \right) - \right. \\ \left. - \frac{\partial T}{\partial q^{\beta}} - \mathcal{F}_{\beta} \right\} dq^{\beta} = 0; \quad (\text{II.2.5})$$

$$\sum \left\{ -\frac{\partial^2 T}{\partial v^{\alpha} \partial v^{\beta}} \left( \frac{X_q^{\alpha}}{X_t} - v^{\alpha} \right) \right\} dv^{\beta} = 0.$$

Az első egyenletet rendezve kapjuk:

$$\sum_{\beta} \left\{ \sum_{\alpha} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial q^{\alpha} \partial v^{\beta}} - \frac{\partial^2 T}{\partial q^{\beta} \partial v^{\alpha}} \right) X_q^{\alpha} - \frac{\partial}{\partial q^{\beta}} \left( T - \sum_{\alpha} v^{\alpha} \frac{\partial T}{\partial v^{\alpha}} \right) X_t + \right. \\ \left. + \sum_{\alpha} \frac{\partial^2 T}{\partial v^{\alpha} \partial v^{\beta}} \frac{X_q^{\beta}}{X_t} + \frac{\partial}{\partial v^{\beta}} \left( T - \sum_{\alpha} v^{\alpha} \frac{\partial T}{\partial v^{\alpha}} \right) \frac{X_{\dot{t}}}{\dot{t}} \right\} dq^{\beta} = 0. \quad (\text{II.2.6})$$



Vezessük be a tömörebb  $\partial_\alpha f = \frac{\partial f}{\partial x^\alpha}$  és  $\partial_{\dot{\alpha}} f = \frac{\partial f}{\partial \dot{x}^\alpha}$  jelöléseket. Az Einstein-konvencióval ekkor

$$v^\alpha = \dot{q}^\alpha / i, \quad \frac{\partial T}{\partial v^\alpha} = \partial_{\dot{\alpha}} \tau, \quad \frac{\partial}{\partial v^\alpha} = i \partial_{\dot{\alpha}} \quad (\text{II.2.7})$$

$$T - \sum_\alpha v^\alpha \frac{\partial T}{\partial v^\alpha} = \partial_{\dot{\alpha}} \tau, \quad dv^\alpha = d\dot{q}^\alpha / i$$

és így a II.2.5 egyenletek

$$\{(\partial_{\alpha\dot{\beta}} \tau - \partial_{\dot{\beta}\alpha} \tau) X_q^\alpha - \partial_{\dot{\beta}n+1} \tau X_t + \partial_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \tau X_{\dot{q}} + \partial_{\dot{\beta}n+1} \tau X_{\dot{t}}\} dq^\beta = 0 \quad (\text{II.2.8})$$

$$\left\{ -\partial_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \tau \left( X_q^\alpha - \frac{\dot{q}^\alpha}{i} X_t \right) \right\} d\dot{q}^\beta = 0$$

egy  $T(Q \times R)$  fölötti 1-forma  $dq$ - és  $d\dot{q}$ -komponensei. Közvetlenül ellenőrizhető, hogy a szóban forgó differenciálforma éppen  $X \lrcorner (dd\tau - F \wedge dt)$ . A kérdés: mi van az így előálló — a  $dt$ -, ill.  $d\dot{t}$ -komponensnek megfelelő két további egyenlettel?  $X \lrcorner (dd\tau - F \wedge dt)$  ugyanis az előző 2n egyenleten felül még két további összefüggést is ad általában. Vegyük azonban figyelembe a II.2.1 tétel formuláit; ekkor — mint az gyorsan kiszámolható — a  $\sum := dd\tau - F \wedge dt$  mátrixa:

$\partial_{\alpha\dot{\beta}} \tau - \partial_{\dot{\beta}\alpha} \tau$	$\partial_\alpha (\tau - \frac{\dot{q}^\beta}{i} \partial_{\dot{\beta}} \tau)$ $-F_\alpha$	$-\frac{1}{i} \partial_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \tau$	$\frac{\dot{q}^\alpha}{i} \partial_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \tau$
	0	$\frac{\dot{q}^\beta}{i} \partial_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \tau$	$\frac{\dot{q}^\alpha}{i} \frac{\dot{q}^\beta}{i} \partial_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \tau$
anti-szimmetrikus		0	

(II.2.9)

és az  $X \lrcorner \sum = 0$ -ból adódó újabb két egyenlet közül ekkor a  $dt$ -komponensnek megfelelő egyenlet az első n egyenlet  $\dot{q}^\alpha/i$ -együtthatókkal képzett lineáris kombinációja; a másik —  $d\dot{t}$ -komponensnek megfelelő — egyenlet pedig a második n —  $X_q^\alpha/X_t = \dot{q}^\alpha/i$  alakú — egyenlet következménye.

Most már csak az  $y \mapsto H_y := \text{Ker } \sum_y$  altérmező integrálhatóságát kell belátni. A  $\sum$  Lagrange-forma azonban zárt: a  $dd\tau$  inercia-tagra ez Poincaré tétele szerint igaz; a  $\Phi$  kölcsönhatási- vagy erőtag esetében pedig  $d\Phi = 0 \Leftrightarrow dF = 0$  és ez teljesül, tekintve, hogy feltételeink szerint a rendszer konzervatív. Mint rövidesen látni fogjuk, ez nem jelent korlátozó kikötést, mert — egy megfelelő tágabb értelemben — minden rendszer „konzervatív” lesz.

Az integrálhatóság bizonyításához már csak az van hátra, hogy a fenti altérmező állandó dimenziós legyen. A  $\sum$  mátrixának vizsgálatával azonban könnyen igazolható:

### II.2.3. Állítás

Legyen  $(Q, T, F)$  egy klasszikus rendszer. Ekkor  $H_y$  2 dimenziós  $\Leftrightarrow [\Sigma]$  mátrix rangja  $2n \Leftrightarrow \left[ \frac{\partial^2 T}{\partial v^\alpha \partial v^\beta} \right]$  mátrix rangja  $= n$ , a kinetikus tenzor reguláris.

### Bizonyítás

A II.2.7 egyenletek tanúsága szerint  $H_y$  pontosan akkor 2 dimenziós, ha a  $\left[ \frac{\partial^2 T}{\partial v^\alpha \partial v^\beta} \right]$  mátrix reguláris. Márpedig a II.2.9 szerint  $[\Sigma]$  rangja éppen  $\left[ \frac{\partial^2 T}{\partial v^\alpha \partial v^\beta} \right]$  rangja. q.e.d.

Így, tekintve, hogy a  $\left[ \frac{\partial^2 T}{\partial v^\alpha \partial v^\beta} \right]$  mátrix regularitását a klasszikus rendszerek definíciójánál eleve kikötöttük, a II.2.1 tétel bizonyítását befejeztük. q.e.d.

Tételünkéből kitűnik a

$$\Sigma := d\tau - \Phi$$

Lagrange-forma fontossága. Felhívjuk a figyelmet, hogy a szóban forgó altérmező egy — látszólag gyengébb — feltétellel is megadható (ld. még [10]):

### II.2.4 Állítás

$$X \in \text{Ker } \Sigma_y \Leftrightarrow \Sigma_y(X, Y) = 0$$

minden, az  $y$  alkalmas környezetében definiált,  $Y = (Y_q, 0, Y_{\dot{q}}, 0)$  alakú vektormezőre.

Eredményeinket összefoglalva mondhatjuk, hogy — legalábbis konzervatív rendszerek esetén — találtunk egy új formalizmust, mely alkalmas a világvonalaknak az evolúciós leveleken át történő koordinátamentes meghatározására.

Figyeljük meg, hogy a Lagrange-forma két tag különbségeként áll elő:

— a  $\theta$  „inerciata” a kinetikus energia kifejezéséből származik;

— a  $\Phi$  „kölsönhatási- vagy erő-tag” félbázikus 2-forma  $F$ -en. Felhívjuk a figyelmet arra, hogy az

$$y \rightarrow H_y := \text{Ker } \Sigma_y$$

formula mindig integrálható altérmezőt definiál, ha i)  $H_y$  állandó dimenziós ii)  $d\Sigma = 0$ .

## II.3 Elektromágneses kölcsönhatás

Tekintsünk először egyetlen,  $\mathbf{E}$ -vel és  $\mathbf{B}$ -vel jellemzett elektromágneses térben mozgó töltött részecskét. Kézenfekvő, hogy a koordinátamentes leírásra alkalmas  $\Sigma_{em}$  Lagrange-formát most is  $\theta_{em} - \Phi_{em}$  alakban keressük, ahol az inerciata ugyanaz, mint közönséges esetben. A II.1 tétel iii) formulája közvetlenül nem alkalmas erőtagnak; viszont az  $F \wedge dt$  alakú formák még nem is merítik ki az összes lehetséges félbázikus 2-formát  $F$ -en. Kísérletezzünk tehát egy — lokálisan  $b_{\alpha\beta} dq^\alpha \wedge dq^\beta$  alakú — tag hozzávételével, azaz legyen

$$\Phi := a_\alpha dq^\alpha \wedge dt + b_{\alpha\beta} dq^\alpha \wedge dq^\beta. \quad (\text{II.3.1})$$



Az  $X \lrcorner \Sigma = 0$  egyenletet ilyen alakú  $\Phi$ -vel felírva, a szokásos  $X_q^\alpha / X_t = \dot{q}^\alpha / \dot{t}$  feltétel mellett a következőt kapjuk:

$$m \frac{1}{X_t} \left( \frac{X_q^\alpha}{\dot{t}} - \frac{\dot{q}^\alpha}{\dot{t}} \frac{X_t}{\dot{t}} \right) = a_\alpha + (b_{\alpha\beta} - b_{\beta\alpha}) \frac{X_q^\beta}{X_t} \quad (\text{II.3.2})$$

tekintettel arra, hogy a bal oldal éppen a tömeg és gyorsulás szorzata (lásd pl. II.2.3-at), a jobb oldalnak a Lorentz-erővel kell megegyeznie, melynek négyes. koordinátákban följírt alakja:

$$e \left( E^\alpha + \left( \frac{X_q}{X_t} \times B \right)^\alpha \right). \quad (\text{II.3.3})$$

Innen az együtthatófüggvények a két kifejezés összevetéséből meghatározhatók. Vektor-alakban:

$$\Phi_{em} = e \{ \langle E, dq \wedge dt \rangle + \langle B, dq \times dq \rangle \} \quad (\text{II.3.4})$$

( $\langle \cdot, \cdot \rangle$  a skalárszorzat  $R^3$ -on).

A  $\Phi_{em}$  pedig már — bár az  $\mathbf{E}$  és  $\mathbf{B}$  mint jól tudjuk, koordinátafüggő — a koordináta-rendszertől független 2-formát definiál. Érdekes fölírni a  $\Phi_{em}$  mátrixát:

$$\left[ \Phi_{em} \right] = \begin{bmatrix} 0 & B^3 & -B^2 & E^1 \\ -B^3 & 0 & B^1 & E^2 \\ B^2 & -B^1 & 0 & E^3 \\ -E^1 & -E^2 & -E^3 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{II.3.5})$$

A klasszikus mechanikában is — akárcsak a relativitáselméletben — bevezethető egy, az elektromágneses kölcsönhatást jellemző antiszimmetrikus tenzormező.  $\Phi_{em}$ -t *Faraday-formának* hívjuk [19].

Az  $n$  részecskére való általánosítás kézenfekvő: az  $i$ -edik test töltését  $e_i$ -vel, az általa (egy koordináta-rendszerben kifejezett) elektromos- és mágneses teret  $E_i$ -, ill.  $B_i$ -vel jelölve, a kölcsönhatási tag a választott koordinátákban:

$$\Phi_{em} = \sum_{i=1}^n e_i \{ \langle E_i, dq_i \wedge dt \rangle + \langle B_i, dq_i \times dq_i \rangle \} \quad (\text{II.3.6})$$

illetve mátrix-alakban:

$$\left[ \Phi_{em} \right] = \begin{bmatrix} \hat{B}_1 & & 0 & E_1 \\ & \hat{B}_2 & & E_2 \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & \hat{B}_n & E_n \\ -E_1 & -E_2 & \cdots & -E_n & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{II.3.7})$$

(itt  $\hat{B}_i$  a  $B_i$ -ből II.3.5 szerint képezett  $3 \times 3$ -as antiszimmetrikus blokkot jelöli).

Az  $y \rightarrow H_y := \text{Ker} (\theta_{em} - \Phi_{em})_y$  altérmező integrálhatóságát a II.5-ben vizsgáljuk majd meg.

## II.4 Spines részecskék

L. H. Thomas 1927-ben az elektron elektromágneses térben való mozgását vizsgálva [24] fölismerete, hogy az mozgásától független saját impulzus- és mágneses momentummal rendelkezik. Bár alapvetően kvantumos jelenséggel állunk szemben, néha mégis hasznos lehet egy klasszikus spin-modell. Az elektron esetében a *Bargman—Michel—Telegdi* egyenletek [2], illetve [24] Thomas empirikus egyenletei alkalmasak erre a célra.

A tapasztalat szerint a saját impulzus- és mágneses momentum vektorai párhuzamosak egymással, és így előállnak egy  $s \in S^2$  egységvektor valós számszorosai-ként, azaz

$$\lambda s, \text{ ill. } \mu s \quad (\text{II.4.1})$$

alakban. ( $\lambda, \mu \in R$ )

A spines részecske kvantummechanikai — illetve relativisztikus egyenletei klasszikus közelítésben Thomas egyenleteibe mennek át:

$$\text{i) } \frac{dq}{dt} = v$$

$$\text{ii) } m \frac{dv}{dt} = e(E + v \times B) + \left[ \frac{\partial B}{\partial q} \right]^* [\mu s] \quad (\text{II.4.2})$$

$$\text{iii) } \lambda \frac{ds}{dt} = \mu s \times B.$$

A spint hordozó  $s \in S^2$  egységvektort tekinthetjük egy további „belső szabadsági foknak”. Modellünkben az összes lehetséges spinvektor halmazát —  $S^2$ -et, az egységgömb felületét — egyszerűen hozzávesszük a konfigurációs térhez. Így az új „konfigurációs tér”  $R^3 \times S^2$  lesz.

Természetesen léteznek más, ekvivalens spin-modellek is. *Souriau* a fentit általános relativitáselméleti megfontolásokból származtatja [22].

Célunk az eddigiekben megismert formalizmus kiterjesztése spines részecskékre.

A tér-idő szerepét természetesen a  $M := R^3 \times S^2 \times R$  6 dimenziós halmaz veszi át, melynek pontjai lokálisan  $(q, s, t)$  alakúak. Egy világvonal most

$$\tau \rightarrow h(\tau) = (h_q(\tau), h_s(\tau), h_t(\tau)) \in M \quad (\text{II.4.3})$$

alakú görbe. A  $\tau$  szerinti fölhúzott nyilván

$$\tilde{h}^* := \left( h, \frac{dh}{d\tau} \right). \quad (\text{II.4.4})$$

A világvonalak fölhúzásával most az

$$F := \{y = (q, s, t, \dot{q}, \dot{s}, \dot{t}): \dot{t} > 0\} \quad (\text{II.4.5})$$

halmaz pontjaihoz jutunk, mely 12 dimenziós sokaság.

Az  $F$  pontjainak állapotokkal való azonosításánál azonban vigyáznunk kell egy kicsit; tekintve, hogy II.4.2 harmadik, spinre vonatkozó egyenlete elsőrendű, így az  $\dot{s}$ -koordináta nem játszik szerepet az állapotjellemzésben.



$F$  két pontját ezek után akkor tekintjük fizikailag ekvivalensnek,  $y_1 \sim y_2$ , ha lokálisan kifejezve

$$\begin{aligned} q_1 &= q_2 & \dot{q}_1 &= \lambda \dot{q}_2 & \lambda > 0 \\ s_1 &= s_2 & & & \\ t_1 &= t_2 & \dot{t}_1 &= \lambda \dot{t}_2. \end{aligned} \quad (\text{II.4.6})$$

A fizikailag ekvivalens pontok azonos állapotokat jelképeznek; az  $E := F/\sim$  faktorsokaság most is az állapotok halmazával (Souriau evolúciós terével,  $R^7 \times S^2$ -vel) azonosítható.

Tekintve, hogy  $\dot{s}$  nem szerepel az állapotjellemzésben, az evolúciós levelek most nem egyszerűen a világvonalak felhúzottjai lesznek; szemléletesen szólva hozzájuk csapjuk még  $R^2$ -t is, ahol az  $\dot{s}$  változhat. Most tehát a II.1.1 ii) jellemzés vihető tovább:

#### II.4.1 Definíció

A  $h$  világvonallhoz tartozó evolúciós levél:

$$\mathcal{H} = \{y \in F: y \sim \tilde{h}^\tau(q) \exists q \in R\}. \quad (\text{II.4.7})$$

A konzervatív rendszereknél bevezetett geometriai apparátus általánosítása azonnal adódik:

#### II.4.2 Állítás

- i) Az evolúciós levelek  $F$  4 dimenziós részsokaságai;
- ii)  $F$  minden pontja pontosan egy evolúciós levélhez tartozik;
- iii) egy evolúciós levél vetülete  $M$ -re éppen a kiindulási világvonal.

A dinamikai leíráshoz olyan 2-formát keresünk, hogy az általa  $y \rightarrow \text{Ker } \sum_y$  szerint meghatározott altérmező egyrészt integrálható legyen, másrészt integrálsokaságai éppen az evolúciós levelek legyenek. Az első kérdést a II.5-re hagyva, a második követelményt úgy elégítjük ki, hogy  $\sum$ -t a II.4.2 Thomas-egyenletekhez illesztjük: a klasszikus elektromágneses kölcsönhatást leíró II.3.4 Lagrange-formát kiegészítjük egy  $\sum_{\text{spin}}$  taggal oly módon, hogy éppen a Thomas egyenleteket kapjuk vissza.  $\sum_{\text{spin}}$ -t szokás szerint egy inercia- és egy kölcsönhatási tag különbségeként keressük. Próbálkozásunk sikeres lesz:

#### II.4.3 Tétel

A spines részecske mozgásegyenletei

$$\frac{d\tilde{h}^\tau}{d\tau}(q) \in \text{Ker } \sum_{\tilde{h}^\tau(q)} \quad (\text{II.4.8})$$

alakban írhatók, ahol a  $\sum$  Lagrange-forma alakja:

$$\sum = \sum_{em} + \sum_{\text{spin}}. \quad (\text{II.4.9})$$

Itt

$$\sum_{\text{spin}} = \Theta_{\text{spin}} - \Phi_{\text{spin}}, \quad (\text{II.4.10})$$

ahol

$$\Theta_{\text{spin}} = -\lambda \langle s, ds \times ds \rangle \quad (\text{II.4.11})$$

és

$$\Phi_{\text{spin}} = d(\langle \mu s, B \rangle). \quad (\text{II.4.12})$$

*Bizonyítás*

A II.4.8 feltételt lokális koordinátákban kiírva a következő alakú (szám szerint tizenkettő) egyenlethez jutunk:

$$\text{a) } (...) dq^\alpha = 0 \quad \alpha = 1, 2, 3$$

$$\text{b) } (...) ds^\beta = 0 \quad \beta = 1, 2$$

$$\text{c) } (...) dt = 0$$

$$\text{d) } (...) d\dot{q}^\alpha = 0 \quad \alpha = 1, 2, 3$$

$$\text{e) } (...) d\dot{s}^\beta = 0 \quad \beta = 1, 2$$

$$\text{f) } (...) dt = 0$$

(az együtthatók kiírása csak bonyolítaná a helyzetet). Ezen egyenletek közül a) a II.4.2 ii)-t, b) II.4.2 iii)-, d) pedig II.4.2 i)-t kell, hogy visszaadja, a többinek pedig azonosságnak kell lennie. Vegyük észre, hogy ha nemcsak  $\Phi_{\text{spin}}$ -t de  $\Theta_{\text{spin}}$ -t is félbázikusnak választjuk, akkor e) azonosan 0 együtthatóval fog állni, mint azt el is várjuk, és d) változatlanul — akárcsak az előzőekben —  $X_q^a/X_t = \dot{q}^a/i$ -ot reprodukálja.  $\Theta_{\text{spin}}$ -t és  $\Phi_{\text{spin}}$ -t ismeretlen együttható-függvényekkel fölírva és a II.4.2 Thomas-egyenletekkel összehasonlítva látjuk, hogy azok csak

$$\Theta_{\text{spin}} = a_\alpha ds^\alpha \wedge dt + b_{\alpha\beta} ds^\alpha \wedge ds^\beta,$$

illetve

$$\Phi_{\text{spin}} = \frac{\partial}{\partial q^\alpha} (\langle \mu s, B \rangle) dq^\alpha \wedge dt + c_\alpha ds^\alpha \wedge dt + d_{\alpha\beta} ds^\alpha \wedge ds^\beta$$

alakúak lehetnek. Ezek közül a)-ba csak  $\frac{\partial}{\partial q^\alpha} \langle \mu, s, B \rangle dq^\alpha \wedge dt$  játszik bele. Előnyös lenne, ha b) együtthatójában az erő-tag —  $c_\alpha ds^\alpha \wedge dt + d_{\alpha\beta} ds^\alpha \wedge ds^\beta$  — éppen a  $ds$ -komponense lenne  $d\langle \mu s, B \rangle \wedge dt$ -nek, vagyis  $\frac{\partial}{\partial q^\alpha} \langle \mu s, B \rangle ds^\alpha \wedge dt$  lenne. Ekkor ugyanis teljes differenciállal volna dolgunk. Maga a iii) Thomas-egyenlet még nem ilyen alakú; ha azonban — mint azt az I. fejezetben, a  $dq^a/dt = v^a$  egyenlet koordináta-mentes alakra való hozatala alkalmával tettük — ekvivalens módon átalakítjuk, ez mégis elérhető lesz. Szorozzuk meg ugyanis az iii) Thomas-egyenletet vektoriálisan  $s$ -el (ez megtehető, mert  $s$  és  $s \times B$  merőlegesek, így a transzformáció reguláris), és fejtsük ki a kettős vektorszorzatot. b)-vel összehasonlítva nyerjük:  $d_{\alpha\beta} = 0$ ,  $c_\alpha = \frac{\partial}{\partial s^\alpha} \langle \mu s, B \rangle$ . Az inerciataag is könnyen adódik  $a_\alpha = 0$ , és így — mint állítottuk —  $\Theta_{\text{spin}} = -\lambda \langle s, ds \times ds \rangle$ . A c) és f) egyenletek azonosan teljesülnek ekkor. q.e.d.  
A II.2.3-mal analóg tétel így szól:



#### II.4.4 Állítás

II.4.8  $F$  minden pontjához egy 4 dimenziós alteret rendel,  $\Leftrightarrow$  ha a  $[\Sigma]$  rangja 8.

A bizonyítás II.2.3 lemásolásával kapható. A  $[\Sigma]$  rangjából  $2 \times 3 = 6$  most is a klasszikus kinetikus tenzor regularitásából jön; a  $+2$ -t a  $\sum_{\text{spin}}$  hozza. A  $\sum_{\text{spin}}$  félbázikus voltából következik a további 2 dimenzió — hasznos! — elvesztése.

#### II.5 A konzervatív rendszerek osztályának kibővítése: A Maxwell-elv

Az I. fejezetben rámutattunk arra, hogy a mechanika legfőbb általános tételei csak konzervatív rendszerek esetén voltak közvetlenül bizonyíthatók. A mechanikai rendszerek ezen osztályának kiváltságos helyzete mellett most újabb érv szól: a II.2 formalizmusa csak akkor adott integrálható altérmezőt, ha a rendszer konzervatív volt. Ez az apparátus formailag kiterjeszthető volt általánosabb rendszerekre is (II.3, II.4); kérdés, mi a helyzet az integrálhatósággal?

Már a II.2 végén felhívtuk a figyelmet arra, hogy a konzervativitás nem szükséges, csak elégséges feltétele az integrálhatóságnak; valójában csak  $\text{Ker } \Sigma$  állandó dimenziós voltát és a  $\Sigma$  zártságát kell biztosítani. Az előzőekben vizsgált rendszerek-nél a  $\text{Ker } \Sigma$  mindig állandó dimenziós volt; így csak a  $d\Sigma=0$  feltétel jelentését kell megértenünk.

1. Klasszikus rendszereknél  $d\Sigma=0 \Leftrightarrow dF=0$ , a rendszer konzervatív;

2. Spines részecskénél  $d\Sigma=0 \Leftrightarrow d\Phi_{em}=0$ , hiszen  $d\Theta_{\text{spin}}$  és  $d\Phi_{\text{spin}}$  eltűnik, lévén  $S^2$  2 dimenziós;  $\Theta_{em}$  szintén zárt, mert  $d\dot{d}\tau$  alakú. Marad:

3. Elektromágneses kölcsönhatás: nézzük, mit jelent itt a  $d\Phi_{em}=0$  feltétel? Lokális koordinátákban az  $\mathbf{n}$ -test probléma esetében:

$$\left[ \frac{\partial E_j}{\partial v_k} \right] = 0 \quad \left[ \frac{\partial B_j}{\partial v_k} \right] = 0 \quad \left[ \frac{\partial B_j}{\partial q_k} \right] = 0 \quad \left[ \frac{\partial E_k}{\partial q_j} \right]^* - \left[ \frac{\partial E_j}{\partial q_k} \right] = 0$$

$$\forall j, k \quad \forall j, k \quad j \neq k \quad j \neq k \quad (\text{II.5.1})$$

$$\text{rot } E_k + \frac{\partial B_k}{\partial t} = 0 \quad \text{div } B_k = 0 \quad \forall k \quad j, k = 1, \dots, n$$

( $j, k$  részecske-index!)

és itt legnagyobb örömünkre az ún. *Maxwell-féle reciprocitási relációkat* és a *Maxwell-egyenletek első* —  $1/c$ -t nem tartalmazó — csoportját ismerjük föl! A  $d\Sigma=0$  feltétel tehát ezen rendszerek fontos regularitási tulajdonságát fogalmazza meg.

A  $d\Sigma=0$  feltételt minden mechanikai rendszerre kikötjük; ez Maxwell-elve. (Souriau [20])

Megemlítendő, hogy így kirekesztjük pl. egy, a levegőben kilőtt golyó mozgásának leírását. Tudjuk azonban, hogy ekkor közelítésekkel dolgozunk: a molekulák és a golyó kölcsönhatását jól-rosszul megalapozott empirikus becslésekkel közelítjük.

## II.6 Általános mechanikai rendszerek

Az előzőekben bevezetett módszerek és eredmények összefoglalásaként megadjuk az általános mechanikai rendszerek definícióját és kimondjuk a rájuk vonatkozó főbb tételeket.

### A. Kinematika

A.1. Minden általánosított mechanikai rendszerhez tartozik egy  $M$  véges dimenziós sokaság, a rendszer *tér-ideje*.  $M$  fölbomlik  $Q \times S \times R$  alakra, ahol  $Q$  a konfigurációs tér,  $S$  további szabadsági fokok — esetleg üres — halmaza,  $R$  az idő. Csak olyan esetekkel foglalkozunk, mikor  $S$  páros (pl.  $2m$ ) dimenziós.  $M$  pontjait lokálisan  $x = (q, s, t)$  alakban írjuk.

A.2. A világvonalak  $M$ -beli szigorúan monoton időkomponensű görbék. Leírásuk céljából  $TM$  egy

$$F := \{(x, \dot{x}) \in TM : \dot{t} > 0\}$$

alakú részhalmazára lépünk ki.

A világvonalak tetszőleges paraméter szerinti felhúzottjai  $F$ -beli görbék.

A.3.  $F$  pontjai között értelmezett egy fizikai ekvivalenciának hívott,  $\sim$ -val jelölt ekvivalencia-reláció:  $y_1 \sim y_2$ , ha

$$q_1 = q_2 \quad \dot{q}_1 = \lambda \dot{q}_2 \quad \lambda > 0$$

$$s_1 = s_2 \quad \text{---}$$

$$t_1 = t_2 \quad \dot{t}_1 = \lambda \dot{t}_2$$

(éppen ez különbözteti meg  $Q$  pontjait  $S$  pontjaitól). Két pont akkor ekvivalens egymással, ha azonos állapotot jelöl. Az  $E := F/\sim$  faktorsokaság az állapotok halmaza.

A.4. Egy világvonal valamely felhúzottjával ekvivalens pontok összessége  $F$  egy  $2m+2$  dimenziós részsokasága, melyet evolúciós levélnek hívunk.  $F$  minden pontján át pontosan egy evolúciós levél halad.

### B. Dinamika

Az evolúciós leveleket dinamikailag egy  $\Sigma$ -val jelölt 2-forma, a rendszer Lagrange-formája határozza meg a

$$H_y := \text{Ker } \Sigma_y \quad (\text{II.6.1})$$

formula szerint. A  $\Sigma$  tulajdonságai:

B.1. A  $\Sigma$  teljes ekvivalencia-osztályok függvénye, más szóval létezik  $E$ -n olyan  $\sigma$  2-forma, melyre

$$\Sigma = (\Pi)_-(\sigma) \quad (\text{II.6.2})$$

( $\Pi: F \rightarrow E$  a természetes projekció). Ezt a tulajdonságot úgy fogalmazzuk meg, hogy a  $\Sigma$  az  $E$ -n, az állapotok halmazán definiált.



Feltételünk azzal áll kapcsolatban, hogy — Souriau [21] nyomán — a  $\Sigma$ -nak közvetlen fizikai jelentést tulajdonítunk. Ezt a  $\Sigma$ -ból származtatható momentumok (energia, impulzus stb.) mérhető volta igazolja.

Ahhoz, hogy a II.6.1 szerinti altérmező integrálható legyen, két feltételre van szükség.

### B.2. Maxwell-elve

$$d\Sigma = 0 \quad (\text{II.6.3})$$

### B.3.

Az  $y \rightarrow H_y$  altérmezőnek állandó dimenziósnek kell lennie. Mivel a  $\Sigma$  az  $E$ -n definiált, a  $\text{Ker } \Sigma$  legalább  $2m+2$  dimenziós. Ha már reguláris nem lehet a  $\Sigma$ , akkor hívhatjuk *szubregulárisnak*, ha „a lehető legregulárisabb”, azaz  $\text{Ker } \Sigma$  minden pontban  $2m+2$  dimenziós, illetve ekvivalensen, ha a  $[\Sigma]$  mátrix rangja  $2n+2m$ . Teljesül ugyanis a  $\dim F = \text{rang } [\Sigma] + \dim \text{Ker } \Sigma$  reláció.

### II.6.1 Állítás

A B.1.—B.3. feltételek teljesülése esetén II.6.1 integrálható altérmezőt definiál<sup>1</sup>  $F$ -en. Az integrálsokaságok  $2m+2$  dimenziósak;  $E$ -re vetítve egy integrálsokaság képe  $E$ -beli görbe.

A bizonyításhoz csak azt kell meggondolni, hogy a  $d \circ \Pi = \Pi \circ d$  összefüggés következtében a  $\Sigma$  által  $F$ -ben és a  $\sigma$  által  $E$ -ben meghatározott altérmezők egyszerre integrálhatók;  $\text{Ker } \sigma$  1 dimenziós;  $X \in \text{Ker } \Sigma \Leftrightarrow$

ha  $Y := D\Pi_y(X) \in \text{Ker } \sigma_{\Pi(y)}$ . q.e.d.

B.4. Semmi nem biztosítja még ekkor, hogy a  $\Sigma$  integrálsokaságai valóban kapcsolatba hozhatók  $M$ -beli görbékkel. Az előzőekben vizsgált esetekben ez abból következett, hogy a  $\text{Ker } \Sigma = 0$  feltétel lokális koordinátákban mindig tartalmazta a  $dq^x/dt = v^x$  egyenletet. Ez a tulajdonság koordinátamentesen a  $d$ -deriválás segítségével, Klein [11] tételének általánosításával fejezhető ki:

### II.6.2 Tétel

Tegyük fel, hogy a  $\Sigma$  2-forma kielégíti a B.1.—B.3. feltételeket. Ekkor annak szükséges és elégséges feltétele, hogy bármely integrálsokaság  $M$ -re való vetülete egyetlen  $M$ -beli görbe legyen az, hogy  $\Sigma$ -ra teljesüljön:

$$d\Sigma = 0. \quad (\text{II.6.4})$$

*Bizonyítás:*  $S = \emptyset$ ,  $m = 0$  esetre a tételt Klein bizonyította be [11]. Az általánosítás belátásához csak azt kell meggondolni, hogy az  $E$ -n definiáltság következtében a  $\Sigma$  nem tartalmazhatja  $s$ -ot, így a  $\text{Ker } \Sigma = 0$  egyenlet mindössze  $2m$ , az  $s$ -koordinátára vonatkozó elsőrendű egyenlettel bővíthet a klasszikus esethez képest. q.e.d.

A B.4. feltétel teljesülése könnyen ellenőrizhető az előzőekben vizsgált rendszereknél. Klasszikus és elektromágneses rendszereknél az inercia-tag  $\Theta = d\dot{d}\tau$

alakú volt. De  $d(d\dot{\tau}) = -d(d\dot{\tau}) = 0$  (lásd a Függelékét). A kölcsönhatási tagot mindig félbázikusnak választottuk; ilyenkor  $d\Phi=0$ -ból  $d\dot{\Phi}=0$  következik. Spines részecskénél a  $d\dot{\Sigma}=0$  feltétel automatikusan teljesül, mert a két dimenziós  $S^2$  sokaságon minden 3-forma eltűnik.

Összefoglalva:

### II.6.3 Definíció

Egy általános mechanikai rendszert egy  $(M, \dot{\Sigma})$  pár jellemez, ahol  $M$  a tér-idő a  $\dot{\Sigma}$  Lagrange-forma pedig a következő tulajdonságokkal rendelkezik:

- B.1.  $\dot{\Sigma}$   $E$ -n definiált
- B.2.  $d\dot{\Sigma}=0$
- B.3.  $\dot{\Sigma}$  szubreguláris
- B.4.  $d\dot{\Sigma}=0$ .

A világvonalak ekkor a 6.II.1 szerinti integrálható altérmező integrálsokaságainak  $M$ -re való vetületei.

### C. Kölcsönhatáselmélet

A  $\dot{\Sigma}$  Lagrange-forma minden esetben két tag különbségeként állt elő. Ez az észrevétel a mechanika egyik legrégebbi elképzeléséhez kapcsolódik (Souriau [20]): már Arisztotelész is úgy tanította, hogy a rendszer valódi mozgásáért („energeia”) permanens részecskék („hüle”) felelősek; a kölcsönhatás („morphé”) hatására a részecskék pályája „eltérül”. A mi nyelvünkön fogalmazva: a részecskék kölcsönhatás nélkül szabadon, egyenes mentén mozognak. A szabad mozgásokat az inercia-tag határozza meg, mely így köteles kielégíteni a B.1.—B.4. feltételeket. A kölcsönhatást a  $\Phi$ -vel vesszük figyelembe, ez „téríti el” a mozgásokat.

A  $\Phi$ -t mindig félbázikusnak választottuk. Ezt elméleti indokok nem támasztják alá; a tapasztalat igazolja a választás jogosságát.

A fentiek evidenssé teszik, hogy a klasszikus mechanika primitív kölcsönhatáselmélete az „anyag” és „kölcsönhatás” merev szétválasztásán, az abszolút, anyagtól független tér és idő létezésén alapul. Nem meglepő tehát, hogy ezek a megfontolások a relativitáselméletben nem állják meg helyüket.

### D. Kapcsolat más felépítésekkel

Az általunk javasolt általános mechanikai rendszerek bővebbek Abraham [1], Godbillon [6], Mackey [17] mechanikai rendszereinél. Az  $E := F/\sim$  állapotsokaság Souriau [20] evolúciós terével azonos. A  $\dot{\Sigma}$  Lagrange-forma éppen Souriau  $\sigma$ -jával egyezik meg (ezért is neveztük ugyanúgy). A kapcsolat II.6.3 definíció és Souriau feltételei között:



B.1.  $\sum$  az  $E$ -n definiált  $\Leftrightarrow \sum = (\Pi)_-(\sigma)$ ,

B.2.  $d\sum = 0 \Leftrightarrow d\sigma = 0$ ,

B.3.  $\sum$  szubreguláris  $\Leftrightarrow \text{Ker } \sigma$  1 dimenziós,

B.4.  $d\sum = 0$ . Erről a feltételről Souriau nem tud. Őt ugyanis nem érdeklik a tér-idő leírásban tárgyalható rendszerek, hanem egyből továbbmegy: a leírást kibővíti 0-tömegű és relativisztikus rendszerekre. Mi ezt nem tesszük meg; a 0-tömegű részecskék (foton, neutrino stb.) mechanikába gyömöszölését nem érezzük természetesnek.

Felépítésünk tehát lényegében Souriau-éval azonos; a B.4. feltétel a variációs elvek tárgyalásánál lesz jelentős.

Klein fölépítése [11], [12] sok rokon vonást mutat. Az általa használt eszközök viszont nehézkesebbek az általunk javasolt fibrált teres módszernél. Klein nem tárgyal spines részecskéket.

### III. FEJEZET

#### HAMILTON ELVÉNEK KITERJESZTÉSE

##### III.1 A statika és dinamika közti analógia

Az előzőekben a mechanika lokális, azaz egyenletekkel dolgozó tárgyalását ültettük át geometriai nyelvre. Különösen elméleti szempontból fontos azonban a másik lehetséges közelítési mód is, mely egy globális „elv”-ből származtatja az egyenleteket. (*Landau és Lifchitz* híres könyvükben [13] Hamilton elvét egyenesen alapaxiómának tekintik!).

A variációs elvek szokásos megfogalmazásukban elektromágneses kölcsönhatásokkal kibővített klasszikus rendszerekre vonatkozó állítások. Spines részecskéknél azonban — elsősorban a klasszikus spin-modell hiánya miatt — a közel-múltig eldöntetlen kérdés volt, vajon bevezethető-e ebben az esetben is variációs formalizmus. A következőkben a probléma teljes megoldását adjuk ([9], [10]).

A sokfajta variációs elv közül csak Hamilton elvével foglalkozunk. Fejtegetéseink vezérfonala a III.1.1 táblázatban összefoglalt statika és dinamika közti analógia lesz.

A táblázat úgy függőlegesen mint vízszintesen három-három részre oszlik. A bal oldali oszlop a statika jól ismert állításait tartalmazza, a középső oszlop azt mutatja, hogy ha végtelen dimenziós sokaságok nyelvén fogalmazunk, a dinamika tételei párhuzamba hozhatók a statika kijelentéseivel. A jobb oldali oszlop a középső oszlop heurisztikus megfogalmazásait önti precíz geometriai formába.

A táblázat felső harmada lényegében a II. fejezet eredményeit foglalja össze. A jobb oldali geometriai és középső heurisztikus megfogalmazás közt az átjárást a Du Bois Reymond lemma geometrizált megfelelője (lásd III.3) biztosítja.

III.1.1 táblázat: a statika és dinamika közti analógia

	Statika	Dinamika	
alaphalmaz	$Q$ konfigurációs tér véges dim. sokaság	$\mathcal{P}$ tér — időbeli pályák halmaza végtelen dim. sokaság	geometriai megfogalmazás
1. lokális megfogalmazás	<p><i>Virtuális munka elve</i>  <math>q</math>-ban egyensúly, ha  <math>S_q(Y) = 0 \quad \forall Y \in T_q Q</math>                      itt  <math>S_q(Y) := \langle F_q, Y \rangle</math>  <math>S_q: T_q Q \rightarrow R</math>                      lineáris függvény a                      tangenstéren</p>	<p style="text-align: center;"><math>\Leftrightarrow</math></p> <p>Du Bois Reymond 1.  <math>h</math> világvonal, ha  <math>\zeta_h(Y) = 0 \quad \forall Y \in T_h \mathcal{P}</math>                      itt  <math>\zeta_h(Y) := \int_{\tilde{h}^\tau} \Sigma(\cdot, \tilde{Y})</math>  <math>\zeta_h: T_h \mathcal{P} \rightarrow R</math>                      lineáris függvény a                      tangenstéren</p>	<p style="text-align: right;"><i>mozgásegyenlet</i></p> <p><math>\frac{d\tilde{h}^\tau}{d\tau}(\varrho) \in \text{Ker } \Sigma \tilde{h}^\tau(\varrho)</math>                      a <math>\Sigma</math> <i>Lagrange-forma</i>  <math>E</math>-n definiált, <math>d\Sigma = 0</math>,                      szubreguláris <math>\Rightarrow</math>  <math>y \rightarrow \text{Ker } \Sigma_y</math> integrálható altérmező                      ha <math>\tilde{d}\Sigma = 0</math>, az integrálsokaságok                      tér—időre való vetületei görbék</p>
2. globális megfogalmazás	<p><i>Minimális potenciál elve</i>                      létezik <math>V: Q \rightarrow R</math>                      függvény, hogy  <math>q</math>-ban egyensúly, ha  <math>dV_q \equiv 0</math>  <math>\Leftrightarrow</math>  <math>dV_q(Y) = 0 \quad \forall Y \in T_q Q</math></p>	<p><i>Hamilton elve</i>                      létezik <math>J: \mathcal{P} \rightarrow R</math>                      függvény, hogy  <math>h</math> világvonal, ha  <math>dJ_h = 0</math>  <math>\Leftrightarrow</math>  <math>dJ_h(Y) = 0 \quad \forall Y \in T_h \mathcal{P}</math>                      absztrakt Euler—                      Lagrange-egyenlet</p>	<p><math>J(h) = \int_{\tilde{h}^\tau} \Lambda</math>  <math>\int_{\tilde{h}^\tau} d\Lambda(\cdot, \cdot) = 0</math>  <math>\Leftrightarrow</math> Du Bois Reymond 1.  <math>\frac{d\tilde{h}^\tau}{d\tau}(\varrho) \in \text{Ker } d\Lambda \tilde{h}^\tau(\varrho)</math>                      a <math>\Lambda</math> <i>Cartan-forma</i> <math>E</math>-n                      definiált szubreguláris <math>\Rightarrow</math>  <math>y \rightarrow \text{Ker } d\Lambda_y</math> integrálható                      altérmező                      ha <math>\tilde{d}\Lambda = 0</math>, az integrálsokaságok                      tér—időre való vetületei görbék</p>
2. $\rightarrow$ 1.	$S = -dV(F = -\text{grad } V)$	$\zeta = -dJ$	$\Sigma = -d\Lambda$
1. $\rightarrow$ 2.	ha $dS = 0$ (rot $F = 0$ ) lokálisan létezik $V$ , hogy $S = -dV$	$d\zeta = 0?$	ha $d\Sigma = 0$ lokálisan létezik $\Lambda$ , hogy $\Sigma = -d\Lambda$
globalizálhatóság	ha $Q$ egyszeresen össze- függő, $V$ kiterjeszthető $Q$ -ra	?	ha $H^2(F, R) = 0$ , $\Lambda$ kiterjeszthető $F$ -re

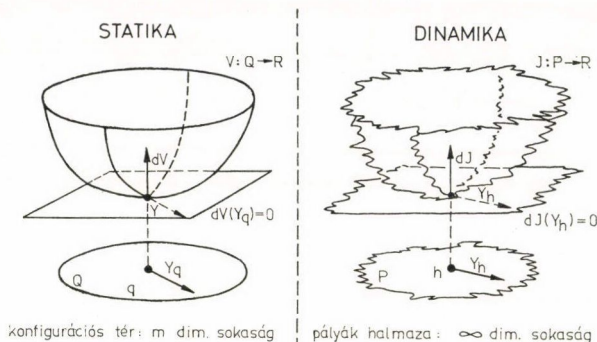
A középső harmad a globális tárgyalásmódot („minimális potenciál elve”, illetve Hamilton-elv) ismerteti, az alsó rész pedig a két közelítési mód viszonyát tisztázza.

Eredményeinkből kitűnik, hogy — eltekintve a dinamikai egyenletek másodrendű voltában gyökerező,  $\tilde{d}$ -feltételben tükröződő különbségtől — az analógia teljes.



### III.2 Hamilton elvének heurisztikus tárgyalása

Hamilton elve heurisztikusan a végtelen dimenziós sokaságok nyelvén fogalmazható meg: a tér két pontját összekötő görbék egy végtelen dimenziós sokaságot alkotnak; a hamiltoni hatás egy valós függvény ezen a sokaságon. Hamilton elve szerint a mozgás-trajektória ezen függvény kritikus pontja, azaz olyan pont a végtelen dimenziós sokaságból, ahol a nevezett függvény differenciálja eltűnik, illetve ekvivalens fogalmazásban, a függvény bármely irányban vett iránymenti deriváltja zérus.



III.2.1. ábra

Ha azonban ezt a gondolatsort pontosítani akarjuk, komoly nehézségekbe ütközünk.

Először is: végtelen dimenziós sokaságon olyan halmazt lenne kézenfekvő érteni, mely lokálisan Banach-terekkel térképezhető (Lang [14]). Ilyen jellegű állítás ismeretes is (Eliasson [3]): Ha  $M$  Riemann-sokaság, akkor az  $M$  két pontját összekötő folytonos görbék halmaza Banach-sokaság. Két baj is van nálunk ezzel: egyrészt a tér-idő a klasszikus mechanikában — ellentétben a relativisztikus esettel — nem Riemann-tér, legfeljebb affin konnexióval, látható el (Misner—Thorne—Wheeler [19]). Hogy az affin struktúra elegendő-e a tétel érvényességéhez, nyitott kérdés. Másrészt a minket érdeklő pályák nem egyszerűen folytonosak, de végtelen sokszor differenciálhatók is.

Másodszor, a hamiltoni hatás közvetlenül nem  $\mathbf{M}$ -beli, hanem  $\mathbf{TM}$ -beli görbéken értelmezett, és ott is tisztázandó, milyen értelemben tekinthető differenciálhatónak. Másrészt valamely  $\mathbf{TM}$ -beli görbe-osztályon vett kritikus pontok közül ki kell válogatni a felhúzott-alakúakat, stb.

Mindebből kitűnik, hogy az idézett heurisztikus gondolatmenet pontossá tétele meghaladná dolgozatunk célkitűzéseit. Szigorúan véve azonban erre nincs is szükség: ha a III.2.1 és III.2.2 tételek állításait szemléletből elfogadjuk, és mintegy motivációnak tekintjük a geometriai tárgyaláshoz, a továbbiakban már precízek lehetünk.

$\mathcal{P}$  mint sokaság

Legyen  $\mathbf{M}$  egy általános mechanikai rendszer tér-ideje. Szemeljünk ki egy világvonalat, és tűzzünk ki rajta két pontot,  $x_1$ -et és  $x_2$ -t. Jelölje az  $x_1$ -et  $x_2$ -vel összekötő görbék halmazát  $\mathcal{P}$ !

## III.2.1 Tétel

$\mathcal{P}$  ellátható olyan végtelen dimenziós sokaságstruktúrával, hogy a  $\mathcal{P}$  érintőtere egy  $h \in \mathcal{P}$  pontban olyan  $\mathbf{Y}$   $\mathbf{h}$ -menti vektormezőkből áll, melyekre

$$i) Y_{x_1} = 0, \quad Y_{x_2} = 0$$

ii)  $\mathbf{Y}$   $\mathbf{M}$  lokális 1-paraméteres diffeomorfizmus-csoportját indukálja.

A tételhez bizonyítás helyett néhány magyarázó megjegyzést fűzünk.

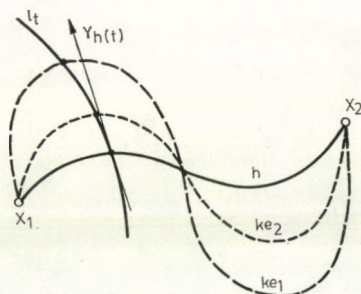
Legyen  $h \in \mathcal{P}$  tetszőleges görbe. A véges dimenziós analógia szerint a  $\mathcal{P}$   $\mathbf{h}$ -beli érintőtere a  $\mathbf{h}$ -n átmenő  $\mathcal{P}$ -beli görbék érintőinek halmaza. Kérdés, mit értsünk érintőn? Egy  $\mathcal{P}$ -beli,  $\mathbf{h}$ -n átmenő görbe egy  $q \rightarrow k_q \in \mathcal{P}$  megfeleltetés, azaz egy, a  $q$  paramétertől függő  $\mathbf{M}$ -beli görbecsalád:

$$\tau \rightarrow k_q(\tau) \in \mathbf{M} \quad \forall q; \quad k_0 = h \quad (\text{III.2.1})$$

Ezen görbecsalád egy tagja egy klasszikus „variált görbe” (lásd a III.2.2 ábrát).

A  $\tau$  paraméter értékét rögzítve a  $q$ -t futtatva jutunk a „transzverzális görbék” családjához. Egy transzverzális görbe:

$$l_\tau := k_{(\cdot)}(\tau). \quad (\text{III.2.2})$$



III.1.2. ábra

Szerencsés esetben — és éppen ez fejtegetéseink kényes pontja — a transzverzális görbék egy, a  $\mathbf{h}$  egy alkalmas környezetében értelmezett  $q \rightarrow \varphi_q$  1-paraméteres lokális diffeomorfizmus-csoport integrálgörbéi. Ezt a továbbiakban kikötjük. Ilyen esetben kézenfekvő a  $q \rightarrow k_q$  görbe  $q=0$ -beli érintőjén a transzverzális görbék  $q=0$ -hoz tartozó deriváltjainak összességét, azaz egy, a  $\mathbf{h}$  mentén értelmezett vektormezőt érteni (Milnor [18], Eliasson [3] Riemann-sokaság esetében állítja ezt).

Az i) feltétel azzal kapcsolatos, hogy a végpontokat nem variáljuk.

A klasszikus mechanikában az időt általában nem variálják. Ez abban mutatkozik meg, hogy a variált görbék

$$k_q = (\gamma_q, t) \quad (\text{III.2.3})$$

alakúak. Ebben az esetben a  $\mathcal{P}$   $\mathbf{h}$ -beli érintőterét  $(Y_q, 0)$  alakú, azaz zérus időkomponensű vektormezők alkotják. A mi felépítésünkben mindkét kiindulás ugyanazon eredményhez vezet.

A későbbiekben szükségünk lesz egy, a tér-időn adott vektormező felhúzójának definíciójára.

Legyen  $\mathbf{X}$  vektormező  $\mathbf{M}$ -en. Ekkor  $\mathbf{X}$  meghatározza  $\mathbf{M}$  egy lokális 1-paraméteres diffeomorfizmus-csoportját,  $\{\psi_t\}$ -t. Tekintsük  $\mathbf{X}$  integrálgörbéit  $(g_x(\cdot))$  és



húzzuk fel őket **TM**-be ( $\tilde{g}_x(\cdot)$ ). A felhúzott görbék kielégítik a következő differenciálegyenletet:

$$\frac{d\tilde{g}_x}{d\tau}(\tau) = \left( X_{g_x(\tau)}, \partial_\beta X_{g_x(\tau)} \frac{dg_x^\beta}{d\tau}(\tau) \right). \quad (\text{III.2.4})$$

Vegyük észre azonban, hogy az **X** integrálgörbéit **TM**-be húzva és deriválva még nem jutunk **TM**-beli vektormezőhöz; (a felhúzottak túl „sovány” halmazt alkotnak ehhez). A III.2.4 jobb oldala viszont nem csak a felhúzott görbék mentén, de az egész **TM** (megfelelő térképre eső) darabján értelmes. Terjesszük ki a felhúzottak deriváltjaiként előálló „sovány mezőt” éppen ezzel a definícióval:

$$\tilde{X}_{(x, \dot{x})} := (X_x, \partial_\beta X_x \dot{x}^\beta). \quad (\text{III.2.5})$$

Így a **TM**-en értelmezett integrálható vektormezőhöz jutunk. Ennek integrálgörbéi tartalmazzák a fentiek szerint az **X** integrálgörbéinek felhúzottját. A III.2.5-öt hívjuk az **X** fölhúzottjának; az  $\tilde{X}$  által meghatározott lokális 1-paraméteres **TM**-beli diffeomorfizmus-csoport a  $\{\psi_\tau\}$  felhúzottja,  $\{\tilde{\psi}_\tau\}$ .

### A hamiltoni hatás

Legyen  $L: TQ \times R \rightarrow R$  egy valós függvény. Legyen

$$\mathcal{L}(q, t, \dot{q}, \dot{t}) := L\left(q, \frac{\dot{q}}{\dot{t}}, t\right) \dot{t}. \quad (\text{III.2.6})$$

Az  $\mathcal{L}$  homogén elsőrendű  $\dot{x}$ -ban, azaz  $\mathcal{L}(x, \lambda \dot{x}) = \lambda \cdot \mathcal{L}(x, \dot{x})$ . Az  $\mathcal{L}$  az  $L$ -hez tartozó homogenizált Lagrange-függvény.

Legyen  $h$  tetszőleges görbe  $\mathcal{P}$ -ből. Ekkor egy  $\tau$  paraméterezést választva a hamiltoni hatás:

$$J(h) = \int_{\tau_1}^{\tau_2} \mathcal{L}\left(h(\tau), \frac{dh}{d\tau}(\tau)\right) d\tau, \quad (\text{III.2.7})$$

mint az egyszerű paraméterváltoztatással belátható. **J** valós értékű függvény  $\mathcal{P}$ -n, a pályák halmazán.

Ugyancsak bizonyítás nélkül fogadjuk el a következő állítást:

#### III.2.2 Tétel

**J** differenciálható függvény  $\mathcal{P}$ -n. A **dJ** differenciál értéke —  $J$  iránymenti deriváltja — egy  $Y \in T_h$  vektor szerint:

$$dJ_h(Y) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{J(\varphi_\tau \cdot h) - J(h)}{\tau}, \quad (\text{III.2.8})$$

ahol  $\tau \rightarrow \varphi_\tau$  az  $Y$  által III.1 Tétel ii) szerint generált 1-paraméteres lokális transzformáció-csoport.

Hamilton elve ekkor azt állítja, hogy a rendszer világvonala a  $J$  kritikus pontja, azaz olyan  $h \in \mathcal{P}$ , ahol

$$dJ_h = 0, \quad (\text{III.2.9})$$

vagyis

$$dJ_h(Y) = 0 \quad \text{minden } Y \in T_h \mathcal{P} \text{ vektormezőre.} \quad (\text{III.2.10})$$

III.2.10-et *absztrakt Euler—Lagrange egyenletnek* hívjuk.

### III.3 A probléma geometrizálása

A variációs probléma geometrizálása — melyet eredményessége igazol — a következő lemmán alapul:

#### III.3.1 Lemma

Legyen  $\mathcal{L}$   $\dot{x}$ -ban homogén elsőrendű függvény  $\mathbf{TM}$ -en. Ekkor létezik egy és csak egy — szükségképpen félbázikus —  $\Lambda$  1-forma  $\mathbf{TM}$ -en, melyre teljesül, hogy tetszőleges  $h$   $\mathbf{M}$ -beli görbére

$$\int_{\tau_1}^{\tau_2} \mathcal{L}\left(h, \frac{dh}{d\tau}\right) d\tau = \int_{\tilde{h}^*} \Lambda. \quad (\text{III.3.1})$$

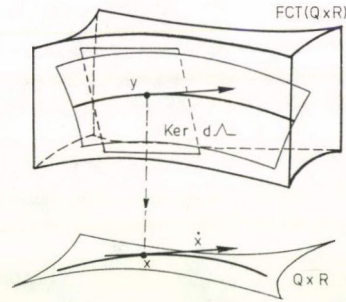
Lokális koordinátákban kifejezve

$$\Lambda = \partial_{\dot{x}^a} \mathcal{L} dx^a \quad (\text{III.3.2})$$

a  $d$ -operátorral felírva

$$\Lambda = d\mathcal{L} \quad (\text{III.3.3})$$

$\Lambda$ -t az  $\mathcal{L}$ -hez tartozó *Cartan-formának* hívjuk.



III.3.1. ábra

#### Bizonyítás

Ha  $\Lambda$  kielégíti III.3.1-et, akkor az lokálisan csak III.3.2 lehet. Tegyük fel ugyanis, hogy

$$\int_{\tau_1}^{\tau_2} \left\{ \mathcal{L}\left(h, \frac{dh}{d\tau}\right) - \Lambda\left(\frac{d\tilde{h}}{d\tau}\right) \right\} d\tau = 0.$$

A  $\Lambda$  1-forma lokálisan fölírható

$$\Lambda = a_\alpha dx^\alpha + b_\alpha d\dot{x}^\alpha$$

alakban.

Innen az Euler-tétel felhasználásával (hiszen  $\mathcal{L}$   $\dot{x}$ -ban homogén elsőrendű):

$$\int_{\tau_1}^{\tau_2} \left\{ (\partial_{\dot{x}^\alpha} \mathcal{L} - a_\alpha) \frac{dh^\alpha}{d\tau} - b_\alpha \frac{d^2 h^\alpha}{d\tau^2} \right\} d\tau = 0. \quad (*)$$



Ez pedig csak  $a_\alpha = \partial_\alpha \mathcal{L}$ ,  $b_\alpha = 0$  esetén lehet igaz minden görbére. Indirekte, ha van olyan  $y_0 = (x_0, \dot{x}_0)$  és  $\alpha$  index, hogy  $a_\alpha(x_0, \dot{x}_0) \neq \partial_\alpha \mathcal{L}$ , akkor az  $a_\alpha$ -k folytonossága következtében  $y_0$ -nak lesz olyan környezete, hogy ott pl.  $(\partial_\alpha \mathcal{L}(y) - a_\alpha(y)) \dot{x}_0^\alpha > 0$  (nem összegezés!) válasszunk itt egy olyan görbét, melynek lokális alakja kielégíti a következő összefüggéseket:

$$\frac{dh^\alpha}{d\tau} = \dot{x}_0^\alpha \quad h^\beta(\cdot) = 0 \quad \beta \neq \alpha \quad \frac{d^2 h^\beta}{d\tau^2} = 0 \quad \forall \beta$$

és átmegy  $y_0$ -on. Ekkor (\*):

$$\int_{\tau_1}^{\tau_2} (\partial_\alpha \mathcal{L} - a_\alpha) \dot{x}^\alpha d\tau > 0$$

ami ellentmondás.

Hasonlóan, olyan görbét választva, melynek egy térképen vett második deriváltja nem tűnik el, belátható, hogy  $b_\alpha(x, \dot{x}) = 0$  minden  $(x, \dot{x})$  és  $\alpha$  esetén.

Ezután az egzisztencia bizonyítása: *definíáljuk*  $\Lambda$ -t lokálisan éppen III.3.2 szerint. Tekintve, hogy ez éppen  $d\mathcal{L}$  lokális alakja, a  $\Lambda := d\mathcal{L}$  definíció már az egész sokaságon értelmes, és könnyen igazolhatóan kielégíti a kívánt III.3.1 összefüggést. Euler tétele szerint ugyanis

$$\mathcal{L}_{(x, \dot{x})} = \partial_\alpha \mathcal{L}_{(x, \dot{x})} \dot{x}^\alpha = d\mathcal{L}_{(x, \dot{x})}(\dot{x})$$

és így tetszőleges görbére

$$\int_{\tau_1}^{\tau_2} \mathcal{L}(\dot{h}^\tau) d\tau = \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\mathcal{L}_{\dot{h}^\tau} \left( \frac{dh}{d\tau} \right) d\tau = \int_{\dot{h}^\tau} d\mathcal{L} \quad \text{q.e.d.}$$

### Hamilton elvének geometriai alakja

Legyen  $M := Q \times R$  egy klasszikus rendszer tér—ideje,  $L$  pedig egy  $L: TQ \times R \rightarrow R$  Lagrange-függvény. Ekkor az  $L$ -et III.2.6 szerint homogenizálva, a hozzá tartozó Cartan-forma:

$$\Lambda = \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} \circ \pi dq^\alpha + \left( L \circ \pi - \frac{\dot{q}^\alpha}{t} \left( \frac{\partial L}{\partial v^\alpha} \circ \pi \right) \right) dt. \quad (\text{III.3.4})$$

A hamiltoni hatás — mint a III.1.1 táblázat állítja —

$$J(h) = \int_{\dot{h}^\tau} \Lambda. \quad (\text{III.3.5})$$

Hamilton elve szerint a világvonalat kitüntető feltétel (III.2.9, illetve III.2.10)  $dJ_h(Y) = 0 \forall Y \in T_h \mathcal{P}$ . De a III.2.2 tétel szerint ez már könnyen számítható:

$$\begin{aligned} dJ_h(Y) &= \lim_{q \rightarrow 0} \left( \int_{\tilde{\varphi}_q, \dot{h}^\tau} \Lambda - \int_{\dot{h}^\tau} \Lambda \right) q^{-1} = \\ &= \int_{\dot{h}^\tau} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{(\tilde{\varphi}_q)_*(\Lambda) - \Lambda}{q} = \int_{\dot{h}^\tau} \mathcal{L}_Y(\Lambda) \end{aligned} \quad (\text{III.3.6})$$

itt  $\mathcal{L}_{\tilde{Y}}(\Lambda)$  a  $\Lambda$  forma  $\tilde{Y}$  szerinti Lie-deriváltja;  $\tilde{Y}$  az  $\mathbf{Y}$   $\mathbf{M}$  fölötti vektormező felhúzottja (III.2.5),  $\varrho \rightarrow \tilde{\varphi}_\varrho$  az  $\mathbf{Y}$  által generált 1-paraméteres lokális diffeomorfizmus-csoport.

Használjuk föl az  $\mathcal{L}_X(\omega) = d(X \lrcorner \omega) - X \lrcorner d\omega$  Cartan-féle összefüggést, mely minden  $\omega$   $p$ -formára és  $X$  vektormezőre igaz. Ekkor az  $Y$  végpontokbeli eltűnése következtében az első, kiintegrált tag zérus marad:

$$dJ_h(Y) = - \int_{\tilde{h}^\tau} \tilde{Y} \lrcorner d\Lambda. \quad (\text{III.3.7})$$

Így Hamilton elvének geometrizált alakja:

$$\int_{\tilde{h}^\tau} \tilde{Y} \lrcorner d\Lambda = 0 \quad \forall Y \in T_h \mathcal{P}. \quad (\text{III.3.8})$$

Innen a szokásos Euler—Lagrange egyenletek a klasszikus Du Bois Reymond-féle lemma geometriai megfelelőjével kaphatók:

### III.3.2 Lemma (Du Bois Reymond)

Legyen  $\sum$  tetszőleges 2-forma  $\mathbf{F}$ -en,  $\mathbf{h}$   $\mathbf{M}$ -beli görbe,  $\mathbf{Y}$  tetszőleges vektormező  $\mathbf{h}$  mentén. Ekkor

$$\int_{\tilde{h}^\tau} \tilde{Y} \lrcorner \sum = 0$$

akkor és csak akkor teljesül minden  $\mathbf{Y}$  vektormezőre, ha

$$\frac{d\tilde{h}^\tau}{d\tau}(\varrho) \in \text{Ker } d\Lambda_{\tilde{h}^\tau(\varrho)} \quad \forall \varrho.$$

A bizonyítás az első és második feltétel lokális alakjának kiírásával, a szokásos Du Bois Reymond lemmára való visszavezetéssel történhet. q.e.d.

A Du Bois Reymond lemma első alkalmazása a táblázat középső oszlopának felső harmadában levő állítást igazolja: a mozgásegyenlet a végtelen dimenziós sokaságok nyelvén

$$\zeta_h(Y) = 0 \quad \forall Y \in T_h \text{ alakú; } \zeta_h(Y) = \int_{\tilde{h}^\tau} Y \lrcorner \sum.$$

Alkalmazzuk lemmánkat a klasszikus Hamilton-elv III.3.8 geometrizált alakjára! Nyerjük, hogy a variációs probléma extrémális görbéi — a  $J: \mathcal{P} \rightarrow \mathbf{R}$  függvény kritikus pontjai — ki kell, hogy elégsék a

$$\frac{d\tilde{h}^\tau}{d\tau}(\varrho) \in \text{Ker } d\Lambda_{\tilde{h}^\tau(\varrho)} \quad (\text{III.3.9})$$

összefüggést. A III.3.4 szerinti  $\Lambda$ -val számolva

$$d\Lambda = \left\{ d \left( \frac{\partial L}{\partial v^\alpha} \circ \pi \right) - \left( \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} \circ \pi \right) dt \right\} \wedge \{ dq^\alpha - v^\alpha dt \} \quad (\text{III.3.10})$$



és így III.3.9 lokális alakja:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial v^\alpha} \right) - \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} = 0 \quad \alpha = 1, \dots, n \quad (\text{III.3.11})$$

$$\frac{dq^\alpha}{dt} = v^\alpha$$

éppen a *klasszikus Euler—Lagrange egyenletek!* (ez az eredmény indokolja, miért hívhattuk III.2.10-et absztrakt Euler—Lagrange egyenletnek).

A III.3.9-et szemügyre véve örömmel ismerjük föl a II. fejezet tárgyalásával való tökéletes formai azonosságot. A leírásban döntő fontosságú  $\sum 2$ -forma szerepét most a  $dA$  játssza. Alkalmazzuk a II. fejezet eredményeit a  $dA$  által meghatározott

$$y \rightarrow H_y := \text{Ker } dA_y \quad (\text{III.3.12})$$

altérmezőre! Tekintve, hogy a  $dA$  Poincaré tétele szerint automatikusan zárt, így az integrálhatósághoz csak az kell, hogy ez az altérmező állandó dimenziós legyen.

A  $A$  III.3.4 kifejezéséből világos, hogy a  $A$   $E$ -n definiált,  $A = (\pi)_*(\lambda)$  ahol

$$\lambda = \frac{\partial L}{\partial v^\alpha} dq^\alpha + \left( L - v^\alpha \frac{\partial L}{\partial v^\alpha} \right) dt \quad (\text{III.3.13})$$

(ezt a  $\lambda$ -t hívja Souriau [20] és Hermann [8] Cartan-formának).

Az  $E$ -n definiáltság következtében a  $\text{Ker } dA_y$  legalább 2 dimenziós. Hívjuk a variációs problémát *regulárnak* ha  $\text{Ker } dA_y$  minden  $y \in F$  esetén pontosan két dimenziós! Ennek szükséges és elégséges feltétele, mint az a  $dA$  III.3.10-ből kiolvasható mátrixának vizsgálatával ellenőrizhető, az, hogy a  $[\partial^2 L / \partial v^\alpha \partial v^\beta]$  mátrix reguláris legyen.

Reguláris esetben tehát állíthatjuk, hogy a III.3.12 formula egy integrálható altérmezőt határoz meg  $\mathbf{F}$ -en. Az integrálsokaságok — melyeket  $A$ -leveleknek hívunk — az  $\mathbf{F}$  két dimenziós részsokaságai. A  $A$ -leveleket a variációs probléma általános megoldásainak tekintjük.

A  $A$   $E$ -n definiált voltából következően a  $dA$  is  $E$ -n definiált, így II.6.1 szerint igaz:

### III.3.3 Állítás

Egy  $A$ -levél képe a  $\pi: F \rightarrow E$  projekciónál egyetlen  $E$ -beli görbe.

A III.3.9-ből következően az eredeti variációs probléma minden extrémális görbéje egy  $A$ -levél (jól definiált!)  $\mathbf{M}$ -re való vetülete; egy extrémális tetszőleges paraméter szerinti felhúzottja teljes egészében egy  $A$ -levél része.

Végezetül megemlítjük, hogy ugyanezen eredményekhez jutottunk volna akkor is, ha az időt nem variáljuk, és zérus idő-komponensű vektormezőkkel dolgozunk. Ennek oka, hogy — akárcsak a II. fejezetben — az  $X \lrcorner dA = 0$  lokális alakjában a  $dt$  és  $di$  együtthatófüggvényei a többi egyenletből következően azonosan eltűnnek.

### III.4 Általános variációs rendszerek

Az előzőekben láttuk, hogy klasszikus rendszerek esetén egy adott  $L$  Lagrange-függvényhez készíthető volt egy  $\Lambda$  félbázikus 1-forma  $T(Q \times R)$ -en azzal a tulajdonsággal, hogy az  $L$  által meghatározott variációs probléma extrémálisai a  $\Lambda$ -levelek  $Q \times R$ -re való vetületeiként álltak elő. Így kézenfekvő az általánosítás:

#### III.4.1 Definíció

Legyen  $M = Q \times S \times R$  egy általánosított mechanikai rendszer tér-ideje. A szokásos jelölésekkel élve tegyük föl, hogy valamely  $y \in F$  pont egy alkalmas  $U \subset F$  környezetében adott egy  $\Lambda$  félbázikus,  $E$ -n definiált 1-forma. Ekkor bármely  $\tau \rightarrow k(\tau) \in U$  görbe esetén értelmes:

$$J(k) := \int_k \Lambda \quad (\text{III.4.1})$$

Ez az általánosított (lokális) hatás.

Egy  $k$   $U$ -ban fekvő görbét lokális extrémálisnak hívunk, ha

$$\int_k Y \lrcorner d\Lambda = 0 \quad \forall Y. \quad (\text{III.4.2})$$

A Du Bois Reymond lemma szerint ahhoz, hogy  $k$  lokális extrémális legyen, szükséges és elegendő, hogy  $U$ -ban teljesüljön:

$$\frac{dk}{d\tau}(q) \in \text{Ker } d\Lambda_{k(q)}. \quad (\text{III.4.3})$$

A  $\Lambda$   $E$ -n definiált voltából következően  $\text{Ker } d\Lambda$  minden pontban legalább  $2m+2$  dimenziós. Az általánosított variációs problémát szubregulárisnak hívjuk, ha  $\text{Ker } d\Lambda$  minden pontban  $2m+2$  dimenziós. Ilyenkor állíthatjuk, az  $y \rightarrow \text{Ker } d\Lambda_y$  altérmező integrálható; integrálsokaságai, a  $\Lambda$ -levelek  $2m+2$  dimenziós részsokaságai  $F$ -nek. Egy  $k \subset U$  görbe pontosan akkor extrémális, ha teljes egészében egy  $\Lambda$ -levélen fekszik. Egy  $\Lambda$ -levél képe a  $\pi: F \rightarrow E$  projekciónál egyetlen  $E$ -beli görbe.

Ilyen általánosságban azonban még nem állíthatjuk, hogy a  $\Lambda$ -levelek tér-időre való vetületei rendre egy-egy görbét eredményeznének. Ehhez még egy feltétel szükséges:

#### III.4.2 Tétel

Annak szükséges és elégséges feltétele, hogy a  $\Lambda$ -levelek  $M$ -re vetítve egy-egy jól definiált  $M$ -beli görbét adjanak az, hogy a  $\Lambda d$  zárt legyen:

$$d\Lambda := 0. \quad (\text{III.4.4})$$

Ilyen feltételek mellett állíthatjuk, hogy a  $\Lambda$ -levelek  $M$ -re való vetületei kielégítik a következő  $2n+2m$  egyenletet:

- $n$   $q$ -ra vonatkozó másodrendű „Lagrange-egyenlet”;
- $2m$   $s$ -re vonatkozó elsőrendű egyenlet;
- $n$   $dq^a/dt = \dot{q}^a/i$  alakú egyenlet.



### Bizonyítás

$S=\emptyset$  esetben a tételt Klein bizonyította be [11]. A számunkra szükséges általánosítás abból adódik, hogy a  $\Lambda$  az  $E$ -n definiált, így  $d\Lambda$  is az; ekkor  $q$  és  $\dot{q}$  mellett csak  $s$ -től függhet,  $\dot{s}$ -től nem. Így az  $X \lrcorner d\Lambda = 0$  feltétel lokális alakja a klasszikus egyenleteken felül csak  $2m$  elsőfokú  $s$ -re vonatkozó egyenletet tartalmazhat. (vö. II.6.2 Tétel). q.e.d.

### III.4.3 Definíció

Legyen adott egy általános mechanikai rendszer. Akkor mondjuk, hogy a rendszer rendelkezik *lokális variációs leírással*, ha bármely pont alkalmas környezetében van olyan  $\Lambda$

- i) félbázikus
- ii)  $E$ -n definiált
- iii) szubreguláris
- iv)  $d$ -zárt

1-forma, hogy a mozgásgörbék a  $\Lambda$ -levelek tér-időre való vetületeiként állnak elő lokálisan.

Jogos a kérdés, hogy viszonylik a most bevezetett lokális variációs leírás-fogalom a szokásos Hamilton-féle megfogalmazáshoz. Láttuk, hogy ha adott egy  $L$  Lagrange-függvény, akkor a homogenizált  $\mathcal{L}$ -en keresztül mindig készíthető globális, az egész alaphalmazon értelmezett  $\Lambda$ .

A megfordítás: ha adott egy homogén elsőrendű  $\mathcal{L}$ , akkor ebből a Lagrange-függvény

$$L(q, s, v, \dot{s}, t) := \mathcal{L}(q, s, t, v, \dot{s}, l) \quad (\text{III.4.5})$$

szerint kereshető vissza.

Elegendő tehát  $\mathcal{L}$ -et találni adott  $\Lambda$ -hoz. A problémát Klein tételének [11] kis általánosításával oldhatjuk meg: ha  $\Lambda$   $E$ -n definiált, akkor homogén 0-rendű, így igaz:

### III.4.4 Tétel

Legyen  $\Lambda$  félbázikus,  $E$ -n definiált. 1-forma  $F$ -en. Ekkor annak szükséges és elégséges feltétele, hogy létezzen olyan  $\mathcal{L}: F \rightarrow R$  homogén elsőrendű függvény, melyre

$$\Lambda = d\mathcal{L}$$

az, hogy a  $\Lambda$  legyen  $d$ -zárt:

$$d\Lambda = 0. \quad (\text{III.4.6})$$

Az  $\mathcal{L}$  szükségképpen egyértelmű. Ha a  $\Lambda$  lokális alakja

$$\Lambda = a_\alpha dx^\alpha,$$

akkor az  $\mathcal{L}$ :

$$\mathcal{L}(x, \dot{x}) = a_\alpha(x, \dot{x}) \dot{x}^\alpha, \quad (\text{III.4.7})$$

illetve  $L$ :

$$L(q, s, v, \dot{s}, t) = \sum_{\alpha=1}^n a_{\alpha}(q, s, t, v, \dot{s}, l) v^{\alpha} + \sum_{\alpha=n+1}^{n+2m} a_{\alpha}(q, s, t, v, \dot{s}, l) \dot{s}^{\alpha} + a_{n+2m+1}(q, s, t, v, \dot{s}, l). \quad (\text{III.4.8})$$

Az  $\mathcal{L}$ , illetve  $L$  nem feltétlenül  $E$ -n definiált!

Így állíthatjuk, hogy az általunk javasolt lokális variációs leírás lokálisan ekvivalens a szokásossal. Kérdés, vajon fizikailag is ekvivalens-e? Rövidesen látni fogjuk, hogy a spines részecske példa olyan rendszerre, melynek nincs globális Lagrange-függvénye. Ennek ellenére az általunk javasolt formalizmus ebben az esetben is érvényben lesz. Lokális koordinátákban meg is konstruálunk egy Lagrange-függvényt, mely azonban nem lesz kiterjeszthető az egész alaphalmazra.

## IV. FEJEZET

### A KÉT KÖZELÍTÉSI MÓD EGYBEVETÉSE

#### IV.1 Inverz probléma

Az előzőekben egy általános mechanikai rendszer mozgásainak leírásához két irányból közelítettünk: a II. fejezetben a mozgásegyenleteket egy  $\sum$  2-forma segítségével

$$X \lrcorner \sum = 0$$

alakban fejeztük ki; a III. fejezetben pedig a klasszikus variációs elv általánosításaként bevezettük a lokális variációs leírás fogalmát. Ekkor a mozgásgörbék egy  $\Lambda$  1-formával fölírt

$$X \lrcorner d\Lambda = 0$$

alakú egyenlet megoldásaiként állnak elő.

Jogos a kérdés: mi a két közelítés viszonya?

Az egyik irányban a válasz világos: ha adott egy, a III.4.3 feltételeket kielégítő  $\Lambda$ , akkor a  $\sum := d\Lambda$  választással egy  $(M, \sum)$  általános mechanikai rendszert definiálunk; ennek mozgásai éppen az általános variációs probléma extremálisai.

A fordított irányú kérdés: adott  $\sum$  mikor származik egy, a III.4.3 feltételeket kielégítő  $\Lambda$ -ból? A választ Klein tétele [12] adja meg:

##### IV.1.1 Tétel

Legyen  $\sum$   $E$ -n definiált, szubreguláris, zárt,  $d$ -zárt 2-forma  $F$ -en. Ekkor bármely  $y \in F$ -nek létezik olyan környezete, hogy ott

$$\sum = d\Lambda, \quad (\text{IV.1.1})$$

ahol a  $\Lambda$  félbázikus,  $E$ -n definiált, szubreguláris,  $d$ -zárt.



## IV.1.1 általános megoldása

$$\Lambda' = \Lambda + df \quad (\text{IV.1.2})$$

alakú, ahol  $f: M \rightarrow R$  függvény a tér-időn (gauge-függvény!)

## IV.1.2 Következmény

*Minden, a II.6.3 definíció szerinti általános mechanikai rendszer rendelkezik lokális variációs leírással.*

A IV.1.1 Tételt a III.4.4 Tétellel kombinálva állíthatjuk:

## IV.1.3 Állítás

*Minden, a II.6.3 definíció szerinti általános mechanikai rendszernek van lokális Lagrange-függvénye. Két lokális Lagrange-függvény a közös értelmezési tartományban gauge-transzformációval kapható egymásból:*

$$\mathcal{L}'(x, \dot{x}) = \mathcal{L}(x, \dot{x}) + \partial_\alpha f(x) \dot{x}^\alpha, \quad (\text{IV.1.3})$$

illetve

$$\begin{aligned} L'(q, s, v, \dot{s}, t) &= L(q, s, v, \dot{s}, t) + \sum_{\alpha=n+1}^{n+2m} \partial_\alpha f(q, s, t) \dot{s}^\alpha + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^n \partial_\alpha f(q, s, t) v^\alpha + \frac{\partial f}{\partial t}(q, s, t), \end{aligned} \quad (\text{IV.1.4})$$

ahol  $f: Q \times S \times R \rightarrow R$  függvény.

A globalizálhatóság az  $\mathbf{F}$  topológiájától függ. Egy elegendő feltétel:

## IV.1.4 Tétel

Ha az  $\mathbf{F}$  második kohomológia-csoportja triviális,  $H^2(F, R) = 0$ , akkor a  $\Lambda$  kiterjeszthető az egész  $\mathbf{F}$ -re.

A bizonyítás megtalálható pl. *Sulanke és Wintgen* könyvében [23].

Tételeink a III.1.1 táblázat alsó harmadának állításait igazolják. A  $d\zeta = 0$  feltevést azért kérdőjeleztük meg, mert nem definiáltuk egy végtelen dimenziós sokaság fölötti forma külső deriváltját. A legelső ketrecben azért áll kérdőjel, mert a kiterjeszthetőség végtelen dimenziós sokaság tálalásban való feltételével nem foglalkoztunk.

## IV.1.5 Megjegyzés

Tételeink lehetőséget nyújtanak arra, hogy eldöntsük, adott egyenletek mikor származtathatók variációs elvből. Ehhez először át kell írni az egyenleteket geometriai formára (az átírás általános módszerével itt nem foglalkozunk; a minket érdeklő esetekben ezt elvégeztük). Ha a kapott 2-forma kielégíti a II.6.3 definíció követelményeit, állíthatjuk, hogy létezik lokális Lagrange-függvény. Megkeresve az illető 2-forma egy potenciálját, a Lagrange-függvény a III.4.7, illetve III.4.8 formulákkal számítható.

Felmerülhet az a kérdés is, hogy adott görbesereg mikor származik variációs elvből. Fizikai fogalmazásban: a mozgásgörbék mennyire határozzák meg az őket leíró fizikai törvényeket? Ebben a fogalmazásban a probléma általában megoldatlan. Hangsúlyozzuk, hogy számunkra az eredetileg vizsgált — és megoldott — probléma lényegesen fontosabb. *Souriau* nyomán [21] ugyanis azt valljuk, hogy a fizika nem csak a mozgásgörbéket, de magát a  $\Sigma$ -t határozza meg.

## IV.2 Példák

### 1. Példa: Klasszikus rendszerek

Emlékezzünk vissza arra, hogy klasszikus rendszereknél a Lagrange-forma  $\Sigma = d\tau - \Phi$  alakú. Maxwell elve szerint a  $\Phi$  kölcsönhatási tag zárt, így létezik lokális potenciál Poincaré tétele értelmében: bármely pont egy alkalmas környezetében  $\Phi = d\psi$ . Ebben a környezetben a Cartan-forma:

$$A = d\tau + \psi + df, \quad (\text{IV.2.1})$$

ahol  $f: Q \times R \rightarrow R$  függvény.

A IV.1.1 tétel szerint a  $\psi$  1-forma félbázikus,  $d$ -zárt, így lokálisan

$$\psi = A_\alpha dq^\alpha - V dt, \quad (\text{IV.2.2})$$

ahol az  $A_\alpha$  és  $V$  valós függvények  $Q \times R$ -en; a  $V$  negatív előjele konvenció kérdése.

A lokális Lagrange-függvény a III.4.8 formula szerint:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(x, \dot{x}) &= \tau(x, \dot{x}) + \dot{x} \lrcorner \psi + \dot{x} \lrcorner df \\ &= \tau(x, \dot{x}) + A_\alpha(x) \dot{q}^\alpha - V(x) + \frac{\partial f}{\partial q^\alpha}(x) \dot{q}^\alpha + \frac{\partial f}{\partial t}(x) \end{aligned} \quad (\text{IV.2.3})$$

és

$$L(q, v, t) = T(q, v) + A(q, t)v^\alpha - V(q, t) + \frac{\partial f}{\partial q^\alpha}(q, t)v^\alpha + \frac{\partial f}{\partial t}(q, t). \quad (\text{IV.2.4})$$

Speciálisan, az elektromágneses  $n$ -test problémánál van  $n$  darab  $A_i: R^3 \times R \rightarrow R^3$  és  $V: R^{3n} \times R \rightarrow R$  vektor-, ill. skalárpotenciálnak hívott függvény, hogy a Faraday-forma potenciálja:

$$\psi = \sum_{i=1}^n A_i dq_i - V dt \quad (\text{IV.2.5})$$

(klasszikus jelölésekkel  $B_i = \text{rot } A_i$ ,  $E_i = -\partial V / \partial q_i$ . Tekintettel az alaphalmaz jó topológiai tulajdonságaira, a Cartan-forma az egész  $R^7$ -en értelmezett

$$\lambda = \sum_{i=1}^n (m_i v_i + A_i) dq_i - \left( \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n m_i v_i^2 + V \right) dt + df, \quad (\text{IV.2.6})$$

ahol  $f: R^{3n} \times R \rightarrow R$  függvény.

A Lagrange-függvény:

$$L(q, v, t) = \sum_{i=1}^n (1/2 m_i v_i^2 + \langle A_i(q, t), v_i \rangle) - V(q, t) + \sum_{i=1}^n \left\langle \frac{\partial f}{\partial q_i}, v_i \right\rangle + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (\text{IV.2.7})$$

Formalizmusunk tehát a klasszikus rendszereknél lehetőséget ad a Lagrange-függvény kényelmes előállítására.



## 2. Példa: Spines részecske

Általános tételeink szerint ekkor is létezik lokális Cartan-forma és Lagrange-függvény. *Globális, az egész  $F$ -en értelmezett Lagrange-forma azonban nem létezhet:* ha ugyanis a  $\sum d\Lambda$  alakú volna, ahol  $\Lambda$  az egész  $F$ -en definiált, akkor Stokes tétele szerint

$$\int_F \sum = \int_F d\Lambda = \int_{\partial F} \Lambda = 0$$

lenne, hiszen az  $F$  sokaság határa,  $\partial F$  üres. Azonnal belátható azonban, hogy

$$\int_F \sum = -\lambda \int_{S^2} \langle s, ds \times ds \rangle = -4\pi\lambda \neq 0.$$

Következésképpen se globális Cartan-forma, se globális Lagrange-függvény nem létezhet!

### Fizikai interpretáció

Souriau ezt az eredményt más úton, közvetve kapja meg. Könyvében [20] egy geometriai kvantálási eljárást javasol. Tétele szerint ha a Lagrange-forma  $d\Lambda$ -alakú, a klasszikus rendszer kvantálható. Így ha a spines részecske Lagrange-formája  $d\Lambda$  alakú lenne, a spines részecske tetszőleges spin értékre kvantálható lenne. Márpedig a tapasztalat szerint a spin csak félegész lehet; így a Lagrange-forma nem lehet egzakt. (Souriau azt is belátja, hogy a spines részecske pontosan akkor kvantálható, ha a spin félegész). Mondhatjuk tehát, hogy a klasszikus Hamilton-elv kis megsértése a *természet alapvetően kvantumossá váltából következik!*

Így a tapasztalat tanúsága szerint az általunk javasolt lokális variációs formalizmus az érvényes.

## IV.3 Lokális variációs formalizmus spines részecskékre

Az irodalomban a spines részecskék Lagrange-függvénye nem ismeretes. Mód-  
szerünk a probléma teljes megoldását szolgáltatja.

Emlékezzünk vissza a spines részecske Lagrange-formájára:

$$\sum = \sum_{em} - \lambda \langle s, ds \times ds \rangle + d\langle \mu s, B \rangle dt. \quad (\text{IV.3.1})$$

A klasszikus taggal nem foglalkozunk. Először egy lokális potenciált kell keresnünk  $\sum_{\text{spin}}$ -nek.

A kölcsönhatási tag eleve egzakt; potenciálja:

$$\psi_{\text{spin}} = \langle \mu s, B \rangle dt \quad (\text{IV.3.2})$$

ami viszont  $d$ -deriváltja

$$\zeta = \langle \mu s, B \rangle i \quad (\text{IV.3.3})$$

-nak. Az inercia-tag potenciálját eleve csak lokális térképen keressük.  $S^2$  egy atlasza nyerhető sztereografikus projekcióval: a két térképet  $\varphi_+$ -szal és  $\varphi_-$ -szal jelölve:

$$\varphi_{\pm}: R^2 \rightarrow S^2 \subset R^3:$$

$$(\varphi_{\pm}(s))^{\alpha} = \pm \frac{2s^{\alpha}}{1+|s|^2} \quad s \in R^2, \alpha = 1, 2 \quad (\text{IV.3.4})$$

$$(\varphi_{\pm}(s))^3 = \pm \frac{1-|s|^2}{1+|s|^2}.$$

Könnyen igazolható, hogy a  $\Theta_{\text{spin}}$  inerciatag potenciálja ezen a térképen

$$\Omega = \pm 2 \frac{s^1 ds^2 - s^2 ds^1}{1+|s|^2}. \quad (\text{IV.3.5})$$

Ezután már csak a III.4.8 formulát kell alkalmaznunk: nyerjük, hogy a spines részecske Lagrange-függvénye:

$$\begin{aligned} L(q, s, t, v, \dot{s}) = & \{1/2mv^2 + \langle A(q, t), v \rangle - V(q, t)\} + \\ & + \left\{ \langle \mu s, B \rangle \pm \frac{2\lambda}{1+|s|^2} (s^1 \dot{s}^2 - s^2 \dot{s}^1) \right\} + \\ & + \left\{ \left\langle \frac{\partial f}{\partial q}(q, s, t), v \right\rangle + \frac{\partial f}{\partial s^{\alpha}}(q, s, t) \dot{s}^{\alpha} + \frac{\partial f}{\partial t}(q, s, t) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{IV.3.6})$$

A IV.3.6 formulán közvetlenül is ellenőrizhető, hogy a lokális Lagrange-függvények nem terjeszthetők ki folytonosan  $T(R^3 \times S^2) \times R$ -re. Ugyanis a

$$\begin{aligned} \text{i)} \quad & s^1 = 0 \quad s^2 \rightarrow \infty, \quad \dot{s}^1 = s^2, \quad \dot{s}^2 = 0 \\ \text{ii)} \quad & s^1 = 0 \quad s^2 \rightarrow \infty, \quad \dot{s}^1 = 0, \quad \dot{s}^2 = 0 \end{aligned} \quad (\text{IV.3.7})$$

által meghatározott pontok egyaránt  $TS^2$  ugyanazon pontjához (nevezetesen az egységgömb alsó — illetve felső pólusbeli 0—érintővektorához) tartanak, de  $L_{\pm}$  az i) esetben  $\pm 1$ -hez, az ii) esetben pedig 0-hoz tart.

#### IV.3.1 Megjegyzés

Érdekes tény, hogy a spines részecske lokális Lagrange-függvénye *nem az állapotok halmazán* definiált. Az  $\dot{s}$  ugyanis, mint mondtuk, nem állapotjelző. Eredményünk azt mutatja, hogy — összhangban felfogásunkkal — a klasszikus mechanikában elsőrendű, *közvetlen fizikai realitással a Lagrange-forma* bír; a Lagrange-függvény mindössze matematikai segédeszköz. Vigyáznunk kell azonban a fizikai realitás fogalmával; megtörténhet, hogy — mint arra *Feynman* a skalár- és vektorpotenciál kapcsán rámutat [4] — az  $\dot{s}$  „fantom-változó” a kvantummechanikában már igenis fontos, közvetlen jelentéssel fog bírni.



## Befejezés

A mechanika általunk követett (Lagrange-féle) felépítése mellett rendkívül fontos a Hamilton-féle kanonikus formalizmus is, melyre csak utaltunk az I. fejezetben. Sejtésünk szerint a Mackey [17]—Abraham [1]—Godbillon [6]-féle módszer általánosításával a hamiltoni formalizmus az általunk vizsgált esetben is bevezethető és a két eljárás ekvivalenciája bizonyítható.

A legfontosabb nyitva hagyott kérdéskör a tér-idő szimmetriák és megmaradási tételek vizsgálata. A geometriai módszer — különösen a kohomológiák elmélete — itt is biztató eredményeket hozhat: lásd pl. Souriau [20], Levi—Leblond [15], [16].

## IRODALOM

1. R. Abraham: Foundations of Mechanics, Benjamin, New York, 1970.
2. V. Bargman, L. Michel, V. L. Telegdi: Phys. Rev. Lett., 2, 435, 1959.
3. J. Eliasson: Introduction to Global Calculus of Variations a Global Analysis and its Applications III. kötetből; Wien, 1974.
4. R. P. Feynman: Mai Fizika III., Műszaki Könyvkiadó Budapest, 1969.
5. F. Gallissot, Ann. Inst. Fourier, Grenoble 4, 1952.
6. C. Godbillon: Géométrie différentielle et mécanique analytique Hermann, Paris, 1969.
7. H. Goldstein: Classical Mechanics, Addison-Wesley, New York, 1950.
8. R. Hermann: Differential Geometry and the Calculus of Variations, Academic Press, New York, 1968.
9. P. Horváthy, L. Úry: Acta Phys. 42, 3, 1977.
10. P. Horváthy: Variational Formalism for Spinning Particles KFKI Reports, 1977—89.
11. J. Klein: Ann. Inst. Fourier. Grenoble, 12, 1962.
12. J. Klein: Ann. Inst. Fourier, Grenoble 13, 2, 1963.
13. L. Landau—E. Lifschitz: Mécanique, Mir, Moscou, 1969.
14. S. Lang: Introduction to the theory of differentiable manifolds, Benjamin, New York, 1962.
15. C. Levi-Leblond: Comm. Math. Phys. 12, 64, 1969.
16. C. Levi-Leblond: A Group Theory and its Applications Vol. III. ed. E. Loebl, Academic Press, New York, 1975.
17. G. W. Mackey: The Mathematical Foundations of Quantum Mechanics, Benjamin, New York, 1963.
18. J. Milnor: Morse Theory, Princeton Univ. Press, Princeton 1963.
19. Ch. W. Misner, K. S. Thorne, J. A. Wheeler: Gravitation, W. H. Freeman and Company, San Francisco, 1974.
20. J.-M. Souriau: Structure des Systemes Dynamiques, Dunod, Paris, 1970.
21. J.-M. Souriau: magánközlés, 1977.
22. J.-M. Souriau: Ann. Inst. H. Poincaré, 20, 4, 1974.
23. R. Sulanke, P. Wintgen: Differentialgeometrie und Faserbündel, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1972.
24. L. H. Thomas: Phil. Mag., 3, 1, 1927.

## Függelék

# DIFFERENCIÁLGEOMETRIAI ÖSSZEFOGLALÓ

ÚRY LÁSZLÓ

ELTE TTK Geometria Tanszék, Budapest

## A. Függelék

### DIFFERENCIÁL- ÉS INTEGRÁLSZÁMÍTÁS SOKASÁGOKON

#### 1. Sokaságok elemi tulajdonságai

Legyen  $M$  egy Hausdorff-féle, megszámlálható bázisú topologikus tér,  $U \subset M$  nyílt halmaz. A  $\varphi: U \rightarrow R^n$  folytonos leképezést  $M$ -beli térképnek nevezzük, ha i)  $\varphi(R^n)$  nyílt halmaz, ii)  $\varphi: U \rightarrow \varphi(R^n)$  homeomorfizmus. Két  $M$ -beli térkép,  $\varphi: U \rightarrow R^n$  és  $\psi: V \rightarrow R^n$  kapcsolt, ha a

$$\varphi \circ \psi^{-1}|_{\psi(U \cap V)}: \psi(U \cap V) \rightarrow \varphi(U \cap V) \subset R^n$$

leképezés  $C^\infty$ -diffeomorfizmus  $R^n$ -ben. Egy  $\mathfrak{A}$   $M$ -beli térképekből álló halmazt  $M$ -beli atlasznak hívjuk, ha bármely két eleme kapcsolt és az  $\mathfrak{A}$ -beli térképek egyesítései lefedik az  $M$  halmazt.

#### Definíció

Egy  $(M, \mathfrak{A})$  párt, ahol  $\mathfrak{A}$  egy  $M$ -beli atlasz, *differenciálható sokaságnak* hívunk. Ha ez nem okoz félreértést, magát  $M$ -et is differenciálható sokaságnak hívjuk, az atlasz feltüntetése nélkül.

Legyen  $(M, \mathfrak{A})$  egy differenciálható sokaság,  $\varphi \in \mathfrak{A}$ .  $\text{dom } \varphi$  elemeit koordinátaízhajjuk  $p = (p^i)$  alakban, ahol  $p^i = \pi^i \circ \varphi(p)$ , ahol  $\pi^i$  az  $R^n$  térnek az  $i$ -ik koordinátatengelyre való vetülete. Az  $\mathfrak{A}$ -beli térképek értékkészlete  $R^n$ -nek egy részhal-maza.  $n$ -t a sokaság dimenziójának nevezzük, jelben  $n = \dim M$ .

#### Példák

1.  $R^n$  az egyetlen id:  $R^n \rightarrow R^n$  térképből álló atlisszal.
2.  $S^n$  az  $n$ -dimenziós gömb. Ha  $\mathbf{E}$ , illetve  $\mathbf{D}$  jelöli az  $n+1$  dimenziós északi, illetve déli pólusát, akkor az atlasz két térképből áll, ezek az északi és déli pólusokból való sztereografikus projekciók.
3. (sokaságok szorzata). Legyen  $M$  és  $N$  két sokaság,  $\mathfrak{A}$ , illetve  $\mathfrak{B}$  a megfelelő atlaszok. Legyen

$$\mathfrak{A} \times \mathfrak{B} = \{\varphi \times \psi \mid \varphi \in \mathfrak{A}, \psi \in \mathfrak{B}\}$$

az  $M \times N$ -en értelmezett atlasz, ahol  $\varphi \times \psi$  az az  $M \times N$ -beli térkép, amelyiket a  $(\varphi \times \psi)(p, q) = (\varphi(p), \psi(q))$  képlet definiál.

4. Például  $S^1 \times S^1 = T^2$  kétdimenziós tórusz.



### Definíció

Legyen  $(M, \mathfrak{A})$  és  $(N, \mathfrak{B})$  két sokaság,  $\dim M$ ,  $\dim N$  legyen  $m$ , illetve  $n$ . Egy  $f: M \rightarrow N$  leképezést differenciálhatónak hívunk, ha tetszőleges  $\varphi \in \mathfrak{A}$  és  $\psi \in \mathfrak{B}$  esetén a következő leképezés differenciálható:

$$\psi \circ f \circ \varphi^{-1}|_{\varphi(f^{-1}(V))}: \varphi(U) \rightarrow \psi(V).$$

Speciálisan, ha  $N = \mathbf{R}$ , akkor az  $f: M \rightarrow \mathbf{R}$  leképezést függvénynek hívjuk, az összes  $\mathbf{M}$ -en értelmezett függvények halmazát  $FM$ -mel jelöljük.

### Lemma

$FM$  a pontonkénti szorzással és összeadással asszociatív, egységelemes gyűrű, illetve  $R$  feletti vektortér.

### Definíció

Legyen  $\mathbf{M}$  egy  $n$  dimenziós sokaság,  $N \subset M$ .  $N$ -et az  $\mathbf{M}$   $k$  dimenziós alterének hívunk, ha tetszőleges  $p \in N$  ponthoz van olyan  $\varphi$  térkép, hogy ezzel a térképpel koordinátázza:

$$N \cap \text{dom } \varphi = \{(x^i, \dots, x^n) | x^{n-k+1} = x^{n-k+2} = \dots = x^n = 0\}.$$

## 2. Tangensnyaláb

### Definíció

Legyen  $\mathbf{p}$  az  $\mathbf{M}$  differenciálható sokaság egy tetszőleges eleme. A  $v: FM \rightarrow R$  lineáris leképezést  $\mathbf{p}$ -beli tangensvektornak hívjuk, ha tetszőleges  $f, g \in FM$  függvényekre teljesül a Leibnitz-szabály:

$$v(f \cdot g) = v(f)g(p) + v(g)f(p).$$

Az összes  $\mathbf{p}$ -beli tangensvektorok halmazát  $T_p M$ -mel jelöljük. A függvények szokásos pontonkénti összeadásával és szorzásával  $T_p M$  a valós test feletti vektortér lesz.

Legyen  $I \subset R$  nyílt intervallum. Egy  $\gamma: I \rightarrow M$  differenciálható leképezést  $\mathbf{M}$ -beli görbének hívunk. Tegyük fel, hogy  $t_0 \in I$ -re  $\gamma(t_0) = p$ . A  $\gamma$  görbe segítségével definiálhatunk egy  $\dot{\gamma}(t_0)$ -vel jelölt  $p$ -beli tangensvektort:

$$\dot{\gamma}(t_0)(f) = \frac{d}{dt} f(\gamma(t))|_{t_0} \quad f \in FM.$$

$\dot{\gamma}(t_0)$ -t a  $\gamma$  görbe  $t_0$ -beli érintőjének hívjuk.

Speciálisan, legyen  $(x^1, \dots, x^n)$   $\varphi$   $\mathbf{p}$ -beli lokális koordinátarendszer. Elég kis  $\varepsilon$ -ra létezik az  $s_i: (p^i - \varepsilon, p^i + \varepsilon) \rightarrow M$ ,

$$s_i(f) = (p^1, \dots, t^i, \dots, p^n)$$

képletekkel definiált görbe. Az  $s_i$  által  $p$ -ben meghatározott tangensvektort  $\frac{\partial}{\partial x_i}(p)$ -vel jelöljük. Így dom  $\varphi$  tetszőleges  $\mathbf{p}$  pontjában kijelöltünk  $n$  darab tangensvektort.

*Lemma*

Ha  $p \in \text{dom } \varphi$ , akkor  $T_p M$ -ben a  $\left\{ \frac{\partial}{\partial x_i}(p) \right\}_{i=1}^n$  rendszer bázist alkot, azaz  $\dim T_p M = n = \dim M$ .

*Definíció*

A  $TM = \bigcup_{p \in M} T_p M$  halmazt az  $M$  sokaság tangensnyalábjának nevezzük. Legyen a  $\pi: TM \rightarrow M$  leképezés úgy definiálva, hogy  $\pi(v) = p$ , ha  $v$  a  $p$ -beli tangensvektor.  $TM$ -en egy  $2n$ -dimenziós sokaságstruktúra vezethető be a következőképpen. Legyen  $M$ -en adva az  $\mathfrak{A}$  atlasz és legyen  $\varphi: U \rightarrow R^n$  egy tetszőleges  $\mathfrak{A}$ -beli térkép. Definiálhatunk egy  $\varphi_*: \pi^{-1}(U) \rightarrow R^{2n}$  leképezést úgy, hogy  $\varphi_*(p, v) = (x^1, \dots, x^n, a^1, \dots, a^n)$ , ahol  $x^i = \varphi(p)^i$  és  $v = a^i \frac{\partial}{\partial x_i}(p)$ . Belátható, hogy így egy sokaságot kapunk és  $\pi: TM \rightarrow M$  differenciálható lesz.

*Definíció*

$M$  feletti vektormezőnek egy  $V: M \rightarrow TM$  differenciálható leképezést nevezünk, amelyre teljesül a  $\pi \circ V = \text{id}_M$  azonosság. Más szóval  $V$  az  $M$  sokaság minden  $p$  pontjához differenciálható módon hozzárendel egy  $p$ -beli tangensvektort.

Nyilván  $V|_{\text{dom } \varphi}$  mindig  $V(p) = a^i(p) \frac{\partial}{\partial x_i}(p)$  alakba írható, ahol az  $a^i$ -k differenciálhatóak.

Az összes  $\mathfrak{A}$  feletti vektormezők halmazát  $VM$ -mel jelöljük.

*Definíció*

Legyen  $X \in VM$  és  $f \in FM$ . Az  $f$  függvény  $X$ -szerinti Lie-deriváltja az az  $\mathcal{L}_X f$ -vel jelölt függvény, amelyik eleget tesz a

$$(\mathcal{L}_X f)(p) = (Xf)(p) \quad p \in M$$

összefüggésnek.

**3. Differenciálformák***Definíció*

Legyen  $V$  az  $R$  feletti vektortér. Egy  $\omega: V^r \rightarrow R$  leképezést  $r$ -kovektornak hívunk, ha  $\omega$  multilineáris és antiszimmetrikus. Az összes  $r$ -kovektorok halmazát  $V^{*r}$ -rel jelöljük. Ha  $\omega \in V^{*r}$  és  $v \in V$ , akkor  $v$  és  $\omega$  kontrakciója az a  $v \lrcorner \omega$ -val jelölt  $(r-1)$ -kovektor, amire

$$(v \lrcorner \omega)(v_1, \dots, v_{r-1}) = \omega(v, v_1, \dots, v_{r-1}).$$

*Definíció*

Legyen  $\omega_1 \in V^{*r}$  és  $\omega_2 \in V^{*s}$ . Ha  $r=s=1$ , akkor az

$$(\omega_1 \wedge \omega_2)(v_1, v_2) = \omega_1(v_1)\omega_2(v_2) - \omega_1(v_2)\omega_2(v_1)$$



képlettel egy 2-kovektort definiáltunk. Általában  $\mathbf{r} + \mathbf{s}$  szerinti indukcióval definiáljuk az  $\omega_1 \wedge \omega_2$   $\mathbf{r} + \mathbf{s}$ -kovektort:

$$(\omega_1 \wedge \omega_2)(v_1, \dots, v_{\mathbf{r}+\mathbf{s}}) = (v_1 \lrcorner \omega_1) \wedge \omega_2 + (-1)^r \omega_1 \wedge (v_1 \lrcorner \omega_2).$$

Könnyű igazolni, hogy  $\omega_1 \wedge \omega_2$  valóban kovektor.

*Lemma*

A  $\text{Ten}(V) = \bigoplus_{r=0}^{\dim V} V^{*r}$  vektortér a  $\wedge$  művelettel asszociatív algebra, amit a  $V$  tenzoralgebrájának hívunk.

Ha  $\{\omega_i\}_1^n$  bázis  $V^*$ -ban, akkor  $\{\omega_{i_1} \wedge \dots \wedge \omega_{i_r} \mid 1 \leq i_1 < \dots < i_r \leq n\}$  bázis  $V^{*r}$ -ben. Így  $\dim \text{Ten}(V) = 2^n$ .

*Definíció*

Ha  $a: V \rightarrow V'$  lineáris leképezés, akkor ez egyértelműen kiterjeszthető egy  $a_*: \text{Ten}(V') \rightarrow \text{Ten}(V)$  leképezéssé, úgy hogy

$$a_*(\omega')(v_1, \dots, v_m) \stackrel{d}{=} \omega'(a(v_1), \dots, a(v_r)).$$

Legyen  $M$  sokaság,  $p \in M$  és jelölje  $T_p M^*$  a  $T_p M$  duális terét. A  $TM^* = \bigcup_{p \in M} T_p M^*$  halmazt az  $M$  sokaság kotangensnyalábjának hívjuk. Ennél általánosabban  $TM^{*r} = \bigcup_{p \in M} T_p M^{*r}$  az  $M$  sokaság  $\mathbf{r}$  típusú tenzornyalábjá.

$TM^{*r}$  differenciálható sokaság, dimenziója  $\mathbf{n} + \binom{\mathbf{n}}{\mathbf{r}}$ .  $TM^{*r}$  egy atlasza a következőképpen épül fel:

Legyen  $\mathfrak{U}$  az  $M$  atlasza, a  $\pi_r: TM^{*r} \rightarrow M$  leképezést megint úgy definiáljuk, hogy  $\omega \in T_p M^{*r}$  esetén  $\pi_r(\omega) = p$ . Legyen  $\varphi: U \rightarrow R^n$  egy az  $\mathfrak{U}$  atlaszban levő térkép.

Definiálunk egy  $\varphi^\wedge: \varphi_r^{-1}(U) \rightarrow R^k$  leképezést, ahol  $k = \mathbf{n} + \binom{\mathbf{n}}{\mathbf{r}}$ . Legyen  $\omega \in T_p M^r$  tetszőleges. Ekkor

$$\omega = \sum_{i_1 \dots i_r} a_{i_1 \dots i_r} \omega_{i_1} \wedge \dots \wedge \omega_{i_r}(p), \quad p = (x', \dots, x^n)_\varphi,$$

ahol

$$\omega_i(p) = \frac{\partial}{\partial y_i}(p)^* \quad \text{azaz} \quad \omega_i\left(\frac{\partial}{\partial x_j}\right) = \delta_{ij}.$$

Legyen

$$\varphi^\wedge(\omega) = (x^1, \dots, x^n, a_{i_1 \dots i_r} \mid 1 \leq i_1 < \dots < i_r \leq n).$$

Könnyű megmutatni, hogy így valóban egy sokaságot kapunk és  $\pi_r$  differenciálható leképezés.

Ha  $r=1$ , akkor tetszőleges  $\omega \in T_p M^{*r}$  reprezentálható egy  $[a_j]_{j=1}^n$  sormátrixszal. Ha  $r=2$ , akkor  $\omega$  reprezentálható egy

$$[\chi] = \begin{bmatrix} a_{11} \dots a_{1n} \\ \vdots \\ a_{n1} \dots a_{nn} \end{bmatrix}$$

mátrixszal, ahol  $a_{ij} = \omega\left(\frac{\partial}{\partial x_i}, \frac{\partial}{\partial y_j}\right)$ . Az  $\omega_i \wedge \omega_j = -1(\omega_j \wedge \omega_i)$  azonosság felhasználásával a  $[\chi]$  mátrix antiszimmetrikus.

*Definíció*

$M$ -beli  $r$ -formának (vagy differenciálható  $r$ -formának) egy  $\omega: M \rightarrow TM^{*r}$  differenciálható leképezést nevezünk, ha  $\pi_r \circ \omega = id_M$ . Lokálisan

$$\omega(p) = \sum_{i_1, \dots, i_r=1}^n a_{i_1 \dots i_r}(p) \omega_{i_1} \wedge \dots \wedge \omega_{i_r}(p),$$

ahol  $\omega_{i_j}$  ugyanaz mint feljebb, az  $a_{i_1 \dots i_r}$ -ek pedig differenciálható függvények.

*Megjegyzések*

1. Ha  $\omega$  egy  $r$ -forma, akkor  $\omega$  egy  $VM^{*r} \rightarrow FM$  differenciálható leképezést definiál, amelyik multilineáris és antiszimmetrikus. Valóban legyen

$$\omega(X_1, \dots, X_r)(p) \stackrel{d}{=} \omega(p)(X_1(p), \dots, X_r(p)).$$

2. Ha  $\varphi: M \rightarrow N$  differenciálható leképezés és  $\omega$   $N$ -beli  $r$ -forma, akkor egyértelműen definiálhatjuk  $\omega$  visszahúzottját, amelyik már  $M$ -beli  $r$ -forma:

$$(\varphi)_-(\omega)(X_1, \dots, X_r) \stackrel{d}{=} \omega(\varphi X_1, \dots, \varphi X_r).$$

3. Ha  $\varphi: M \rightarrow N$  diffeomorfizmus, akkor  $\varphi^{-1}$  segítségével az  $M$ -beli  $r$ -formák visszahúzottját is definiálhatjuk, legyen ugyanis

$$(\varphi)_+ = (\varphi^{-1})_-.$$

4. Az  $M$ -beli  $r$ -formák halmazát  $FM^r$ -rel jelöljük.

**4. Lie-szorzás és a külső deriválás**

Hasonlóan a függvények Lie-deriválásához tetszőleges formának definiálhatjuk az  $X$  mező szerinti deriváltját:

*Definíció*

Legyen  $M$  differenciálható sokaság. Két  $M$ -beli vektormező,  $X$  és  $Y$  Lie-szorzatát a következőképpen értelmezzük:

$$[X, Y](p)(f) = X(p)Yf - Y(p)Xf.$$

A Lie-szorzásra a következő azonosságok teljesülnek:

- a)  $[X, Y] = -[Y, X]$
- b)  $[X, [Y, Z]] = [[X, Y], Z] + [Y, [X, Z]]$
- c)  $[X, fY] = X(f)Y + f[X, Y]$ .

Lokálisan  $[X, Y] = \left( \frac{\partial Y^i}{\partial x_j} X^j - \frac{\partial X^i}{\partial x_j} Y^j \right) \frac{\partial}{\partial x_i}$  hacsak  $X = X^i \frac{\partial}{\partial x_i}$  és  $Y = Y^i \frac{\partial}{\partial x_i}$ .



*Definíció*

Legyen most  $\omega \in FM^r$ ,  $X \in VM$ . Az  $\omega$ -forma  $X$ -mező szerinti Lie-deriváltja az az  $\mathcal{L}_X \omega$ -val jelölt  $r$ -forma, amelyre

$$(\mathcal{L}_X \omega)(X_1, \dots, X_r) = \mathcal{L}_X(\omega(X_1, \dots, X_r)) + \omega([X, X_1], \dots, X_r) + \dots \\ \dots + \omega(X_1, \dots, [X, X_r]).$$

*Lemma*

- a)  $\mathcal{L}_X(Y \lrcorner \omega) = [X, Y] \lrcorner \omega + Y \lrcorner \mathcal{L}_X \omega$
- b)  $\mathcal{L}_X(\omega_1 \wedge \omega_2) = \mathcal{L}_X \omega_1 \wedge \omega_2 + \omega_1 \wedge \mathcal{L}_X \omega_2$ .

*Definíció*

Legyen  $f \in FM$ . Legyen  $df \in FM^1$  az a forma, amelyik lokálisan  $df = \frac{\partial f}{\partial y_i} \omega^i$  alakban adható meg. (\*)

*Lemma*

$$X \in VM \text{ és } f \in FM \text{ esetén } \mathcal{L}_X(df) = d\mathcal{L}_X(f).$$

Végül  $d$ -t teljes indukcióval kiterjesztjük  $FM^r$ -re.

*Tétel*

A fenti  $d$  az egyetlen olyan operáció az  $\bigcup_{r=0}^n FM^r$  halmazon, amelyik eleget tesz a következő tulajdonságoknak:

- i)  $f \in FM$ -re  $df$  a (\*) képlettel definiált.
- ii)  $X \in VM$  esetén  $\mathcal{L}_X(d\omega) = d\mathcal{L}_X(\omega)$ .
- iii)  $\omega_1 \in FM^r$  esetén  $d(\omega_1 \wedge \omega_2) = d\omega_1 \wedge \omega_2 + (-1)^r \omega_1 \wedge d\omega_2$ .
- iv)  $d$  lineáris  $FM^r$ -en.
- v)  $d \circ d = 0$ .

Lokálisan a fenti  $d$  az  $\omega = \sum a_{i_1 \dots i_r} \omega^{i_1} \wedge \dots \wedge \omega^{i_r}$  formán így hat:

$$d\omega = \sum da_{i_1 \dots i_r} \wedge \omega^{i_1} \wedge \dots \wedge \omega^{i_r}.$$

*Lemma*

Ha  $\varphi: M \rightarrow N$  differenciálható, akkor tetszőleges  $N$ -beli formára:

$$(\varphi)_*(d\omega) = d(\varphi)_* \omega.$$

A  $d \circ d = 0$  képlet felveti azt a kérdést, vajon ha egy  $\omega$  formára  $d\omega = 0$ , akkor vajon  $\omega$  előáll-e  $\omega = d\sigma$  alakban. A válasz:

*Tétel (Poincaré)*

Ha egy  $\omega \in FM^r$  formára  $d\omega=0$ , akkor tetszőleges  $p$  pont környezetében előáll  $\omega$  az  $\omega=d\sigma$  alakban.

Hogy globális előállítás mikor létezik, az a megfelelő kohomológia csoport trivialitásán múlik. Ez a feltétel azért jól hasznosítható, mert a sokaság geometria tulajdonságaiból el lehet dönteni, hogy a kohomológia csoportok eltűnnek-e vagy sem.

*Definíció*

Legyen  $X \in VM$ ,  $\sigma: I \rightarrow M$  tetszőleges görbe. Azt mondjuk, hogy a  $\gamma$  görbe az  $X$  vektormező integrálgörbéje, ha

$$\dot{\gamma}(t) = X(\gamma(t)) \quad t \in I.$$

*Tétel*

a) Ha  $\gamma_1$  és  $\gamma_2$  az  $X$  vektormező két integrálgörbéje és  $\gamma_1(t_0) = \gamma_2(t_0)$ , akkor  $\gamma_1 = \gamma_2$  a  $\text{dom } \gamma_1 \cap \text{dom } \gamma_2$  halmazon.

b) Ha  $x_0 \in M$ , akkor  $x_0$ -on egyetlen maximális integrálgörbe halad át és ez differenciálható módon függ  $x_0$ -tól.

c) Ha  $\gamma$  az  $X$  integrálgörbéje, akkor  $\gamma^*(t) = \gamma(t+c)$  is az.

*Megjegyzések*

1. Lokálisan, ha  $X = A^i \frac{\partial}{\partial x_i}$  akkor a  $\gamma$  görbe pontosan akkor lesz az  $X$  integrálgörbéje, ha

$$\frac{d}{dt} X_i(\gamma(t)) = \dot{\gamma}(t)(X_i) = \chi(\gamma(t))(X_i) = A^i(\gamma(t)).$$

2. A tétel az autonom differenciálegyenletek sokaságbeli megfelelője.

3. Az  $x_0$ -ból induló megoldás  $t$  helyen felvett értékét jelöljük  $X_t(x_0)$ -al. Ekkor az  $X_t: M \rightarrow M$  leképezések segítségével egy lokális egy-paraméteres csoportot definiáltunk, ezt az  $X$  által generált *lokális egyparaméteres csoportnak* nevezzük.

Nem nehéz belátni, hogy tetszőleges egyparaméteres csoporthoz találhatunk olyan  $X$  vektormezőt, hogy az ehhez tartozó lokális egyparaméteres csoport azonos legyen a kiindulási csoporttal.

4. Tekintsük azt az esetet, amikor  $\mathfrak{g} \in FM^2$  és  $F \in FM^1$  és pontosan egyetlen  $X \in VM$  létezik, hogy  $X \lrcorner \mathfrak{g} = F$ . Ebben az esetben az  $X$  integrálgörbéit az  $X \lrcorner \mathfrak{g} = F$  implicit differenciálegyenlet megoldásainak nevezzük.

**5. Integrálás sokaságokon***Definíció*

Az  $n$ -dimenziós  $M$  sokaság *irányítható*, ha van olyan  $\omega \in FM^n$ , hogy tetszőleges  $p \in M$ -re  $\omega(p) \neq 0$ .  $\omega$ -t ekkor az  $M$  sokaság *irányításának* nevezzük. Az  $\omega_1$  és  $\omega_2$  irányítások ekvivalensek, ha  $\omega_1 = f\omega_2$  és  $f(p) > 0$  mindenütt.



Legyen  $\varphi \in \mathfrak{A}$ ,  $\varphi: U \rightarrow R^n$   $M$ -beli térkép.  $\varphi$  pozitívan irányított az  $\omega$  irányításra nézve, ha

$$dx_1 \wedge \dots \wedge dx_n = f \cdot \omega \quad \text{és} \quad f > 0 \quad U - n.$$

Az  $f: M \rightarrow R$  függvény mérhető, ha tetszőleges  $\varphi \in \mathfrak{A}$ -ra

$$f \circ \varphi^{-1}|_{\varphi(U)}: \varphi(U) \rightarrow R$$

mérhető.

A következőkben definiálni fogjuk az  $f$  függvény  $\Theta \in FM^n$  forma szerinti integrálját.

i) Tegyük fel, hogy  $\text{supp } f \subset \text{dom } \varphi$  alkalmas  $\mathfrak{A}$ -beli térképre. Ekkor létezik egy  $D \subset R^n$  nyílt halmaz, hogy  $\varphi: D \rightarrow U = \text{dom } \varphi$  diffeomorfizmus. Tegyük fel, hogy  $\varphi$  pozitívan irányított egy  $\omega$  irányításra és legyen

$$\int_M f \Theta = \int_D (f \circ \psi) g \, dx_1 \dots dx_n,$$

ahol  $g$  olyan, hogy  $(\psi)_*(\Theta) = g \, dx_1 \wedge \dots \wedge dx_n$ .

Megmutatható, hogy az így definiált érték független a  $\varphi$  speciális választásától.

#### Tétel

Legyen  $\mathfrak{A} = \{U_i\}^\infty$  az  $M$  sokaság egy nyílt fedése. Ekkor van olyan  $\{f_i\}$  függvényrendszer, hogy

- a)  $\text{supp } f_i \subset U_i$  és kompakt,
- b) a  $\{\text{supp } f_i | i \in \mathbb{N}\}$  rendszer lokálisan véges,
- c)  $f_i \geq 0$  és  $f_i \in FM$ ,
- d)  $\sum_{i=1}^\infty f_i = 1$ .

ii) Legyen most  $\mathfrak{A}$  tetszőleges atlasz, ebből a sokaság  $M_2$  tulajdonsága alapján kiválasztható egy  $\mathfrak{B}$  megszámlálható fedés. Legyen  $\{f_i\}_{i=1}^\infty$  az ehhez az előző tétel alapján tartozó egységosztás. Ezután tetszőleges  $f: M \rightarrow R$  mérhető függvénye legyen.

Ez utóbbi független az atlasz és az egységosztás speciális választásától és ezért az  $f$  mérhető függvény  $\Theta$  forma szerinti integráljának nevezzük (a rögzített  $\omega$  irányítás mellett!)

#### Tétel

Legyenek  $F, f, f_i$  ( $i=1, 2, \dots$ ) az  $M$ -en mérhető függvények és legyen  $F$  integrálható  $\Theta$  szerint. Tegyük fel, hogy m. m.  $\lim_{i \rightarrow \infty} f_i = f$  és m. m.  $|f_i| \leq F$ . Ekkor létezik  $\int_M f \Theta$  és

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \int_M f_i \Theta = \int_M f \Theta.$$

(A nagy Lebesgue-tétel megfelelője.)

## 6. Görbe-menti integrálás

Az elkövetkezőkben a formák integrálását fogjuk definiálni. Az eljárás általános esetben igen bonyolult, ezért először az egydimenziós esettel világítjuk meg. Legyen  $\gamma: I \rightarrow M$  az  $n$ -dimenziós sokaságban fekvő görbe,  $\omega \in FM^1$  tetszőleges 1-forma. Ekkor visszahúzottja  $(\gamma)_*\omega$  már az  $I$  intervallumon értelmezett 1-forma, amibe ha behelyettesítjük a  $\frac{\partial}{\partial t}$  bázismezőt, akkor  $[a, b]$ -n egy egyváltozós függvényt kapunk. Legyen az  $\omega$  1-forma  $\gamma$ -menti integrálja:

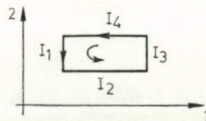
$$\int_{\gamma} \omega \stackrel{\text{d}}{=} \int_a^b ((\gamma)_*\omega) \left( \frac{\partial}{\partial t} \right) dt.$$

Hasonlóan járunk el általánosan is, ha  $K_m$  egy  $m$ -dimenziós téglá, akkor egy  $\omega \in FM^m$  formának a  $\gamma: K^m \rightarrow M$  úgynevezett elemi  $m$ -dimenziós görbe melletti integrálja:

$$\int_{\gamma} \omega = \int_{K^m} ((\gamma)_*\omega) \left( \frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_m} \right) dx_1 \dots dx_m,$$

ahol az utóbbi integrál az  $R^m$ -beli Lebesgue-féle integrál.

Ilyen általános körülmények között is kimondható Stokes tétele, csupán pontosítani kell, mit értünk egy görbe határán. Ezt egy kétdimenziós téglalapon illusztrálhatjuk a legjobban. Az ábrán látható téglalap oldalai egybevágósági transzformációk segítségével átvihetők  $R^1$ -be és ezek segítségével összesen négy 1-dimenziós görbét definiálhatunk a  $\gamma_j: I_j \rightarrow M$ ,  $\gamma_j = \gamma|_{I_j}$  képletekkel.



Legyen ezekután  $\omega \in FM^1$ . Stokes tétele így írható fel:

$$\int_{\gamma} d\omega = \sum_{i=1}^h \int_{\gamma_i} \omega.$$

Ez utóbbi forma sugallja azt, hogy görbének ne csak a  $\gamma: K^m \rightarrow M$  alakú leképezéseket, hanem ezek formális véges lineáris kombinációit is görbének tekintjük:

$$\gamma = \sum_{i=1}^T r_i \gamma_i.$$

Egy ilyen görbe melletti integrált a

$$\int_{\gamma} \omega = \sum_{i=1}^T r_i \int_{\gamma_i} \omega$$



képlettel definiálunk. Ha ezekután a példánkban szerepelt  $\gamma$  elemi görbe határát a  $\partial\gamma = \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 + \gamma_4$  görbének definiáljuk, akkor Stokes tételét a következő igen elegáns alakba írhatjuk:

$$\int_{\gamma} d\omega = \int_{\partial\gamma} \omega.$$

Ez utóbbi már tetszőleges dimenziójú görbére és vele egyenlő dimenziójú formára érvényes.

## B. Függelék

### FIBRÁLT SOKASÁGOK

#### Definíció

Legyen  $M$  egy  $n$ -dimenziós sokaság és tegyük fel, hogy adott egy olyan hozzárendelés, mely  $M$  minden pontjához az  $M$  illető pontbeli érintőterének egy, a pont választásától független dimenziójú alterét rendeli hozzá:

$$H: M \ni x \rightarrow H_x \subset T_x M.$$

$H$ -t *altérmezőnek* hívjuk.

Az  $x \rightarrow H_x$  altérmező differenciálható, ha értelmezési tartománya lefedhető olyan nyílt halmazokkal, melyekben megadható  $m$  olyan differenciálható vektormező,  $T^1, \dots, T^m$ , hogy bármely  $x \in M$  pontban a  $T_x^1, \dots, T_x^m$  vektorok a  $H_x$  egy bázisát alkotják. A következőkben csak differenciálható altérmezőkkel dolgozunk, ezért a differenciálható jelzőt elhagyjuk.

#### Definíció

Legyen  $x \rightarrow H_x$  egy altérmező  $M$ -en.  $\mathcal{H}$  az altérmező egy *integrálsokasága*, ha

i)  $\mathcal{H}$  az  $M$  részsokasága,

ii)  $\mathcal{H}$  minden pontjában a  $T_x \mathcal{H}$  érintőtér éppen  $H_x$ .

Az  $x \rightarrow H_x$  altérmező *integrálható*, ha  $M$  minden pontján át pontosan egy maximális integrálsokaság halad. Az  $M$  neve ilyenkor *fibrált sokaság*, az integrálsokaságokat *leveleknek* hívjuk.

#### Tétel (Frobenius)

Egy  $x \rightarrow H_x$  altérmező pontosan akkor integrálható, ha teljesül a következő állítás:

Ha egy nyílt halmazban az  $X$  és  $Y$  vektormezők olyan tulajdonságúak, hogy  $X_x \in H_x$  és  $Y_x \in H_x$  minden  $x$ -re ebben a nyílt halmazban, akkor  $[X, Y]_x \in H_x$ , ahol  $[\cdot, \cdot]$  a Lie-szorítás.

#### Példák

1. Legyen  $Q$   $n$ -dimenziós sokaság. Legyen adott  $Q$ -n egy  $X$  vektormező. Jelölje  $M$  a  $Q \times R$  sokaságot. Vezessük be  $M$ -en a következő altérmezőt:

$$H_{(q,t)} \stackrel{d}{=} \{(Z_q, Z_t) \in T_{(q,t)} M \mid Z_q - X_q Z_t = 0\}.$$

A  $H$  altérmező minden ponthoz egy 1-dimenziós alteret rendel, így az integrálhatóság az autonom differenciálegyenletek egzisztenciátétele alapján teljesül, például az  $X$  mező által meghatározott egyenlet megoldásgörbéinek a gráfjai kielégítik a kívánt összefüggést. Ugyanakkor nem minden integrálsokaság lesz egy megoldás gráfja. A fenti altérmező leveleit ezért a differenciálegyenlet általánosított megoldásainak tekinthetjük.

2. Legyen adva egy  $\sum$  zárt  $p$ -forma az  $M$  sokaságon, és legyen

$$H_x = \{X \in T_x M: X \lrcorner \sum = 0\}$$

más jelöléssel  $H_x = \text{Ker } \sum$ .

Tegyük fel, hogy a  $H_x$  minden pontban ugyanolyan dimenziós.

### Állítás

A fenti altérmezőre automatikusan teljesül az integrálhatósági kritérium, az integrálsokaságokat a  $\sum$  karakterisztikus leveleinek hívjuk.

## C. Függelék

### A $\mathfrak{d}$ -OPERÁTOR

Ha egy sokaság egy másik sokaság tangensnyalábja, akkor a külső differenciálás  $d$  operátora mellett bevezethető egy újabb,  $\mathfrak{d}$ -tal jelölt operátor is (Klein [11], [12], Godbillon „ $d_v$ ”-je [6], hasonló Abraham [1] „fiber derivative”-ja is).

Először is  $TM$ -en értelmezett differenciálformák lokálisan

$$\begin{aligned} \omega = & a_{\alpha_1 \dots \alpha_p} dx^{\alpha_1} \wedge \dots \wedge dx^{\alpha_p} + b_{\alpha_1 \dots \alpha_p} d\dot{x}^{\alpha_1} \wedge \dots \wedge d\dot{x}^{\alpha_p} + \\ & + \sum_i c_{\gamma_1 \dots \gamma_i \delta_1 \dots \delta_{p-i}} dx^{\gamma_1} \wedge \dots \wedge dx^{\gamma_i} \wedge d\dot{x}^{\delta_1} \wedge \dots \wedge d\dot{x}^{\delta_{p-i}} \end{aligned}$$

alakba írhatóak, ahol  $(x, \dot{x})$  a  $TM$  konstrukciójában szereplő lokális koordináta-rendszer. Egy  $\omega$  formát félbázikusnak hívunk, ha csak  $dx^\alpha$ -k szerepelnek benne nem nulla együtthatóval. Ezután rátérünk  $\mathfrak{d}$  megkonstruálására.

Első lépésben függvényekre definiáljuk a  $\mathfrak{d}$ -ot. Ha  $f: TM \rightarrow R$  függvény, akkor legyen lokálisan

$$df \stackrel{d}{=} \partial_{\dot{x}} f dx^\alpha.$$

Belátható (lásd [12])-t), hogy így egy félbázikus 1-formát definiáltunk  $TM$ -en. Ha  $f$   $\dot{x}$ -ban homogén  $k$ -ad rendű, akkor  $df$  homogén  $k-1$ -ed rendű lesz.

Második lépésben a  $\mathfrak{d}$  operátort kiterjesztjük  $TM$  magasabb rendű differenciálformáira a következő definiáló tulajdonságok segítségével:

- i)  $\mathfrak{d}(\omega_1 + \omega_2) = \mathfrak{d}\omega_1 + \mathfrak{d}\omega_2$
- ii)  $\mathfrak{d}(\omega_1 \wedge \omega_2) = \mathfrak{d}\omega_1 \wedge \omega_2 + (-1)^{\deg \omega_1} \omega_1 \wedge \mathfrak{d}\omega_2$
- iii)  $\mathfrak{d}(d\omega) = -d(\mathfrak{d}\omega)$ .

Így a  $\mathfrak{d}$  minden  $p$ -forma esetén definiált és így egy  $+1$  fokú antiderivációt nyerünk, amelyik antikommutál  $d$ -vel.



*Lokális kifejezés*

Ha az  $\omega$  forma lokálisan

$$\omega = a_{\alpha_1 \dots \alpha_p} dx^{\alpha_1} \wedge \dots \wedge dx^{\alpha_p} + b_{\alpha_1 \dots \alpha_p} d\dot{x}^{\alpha_1} \wedge \dots \wedge d\dot{x}^{\alpha_p}$$

alakú, akkor  $d\omega$  lokális alakja:  $\sum_i c_{\gamma_1 \dots \gamma_i \delta_1 \dots \delta_{p-i}} dx^{\gamma_1} \wedge \dots \wedge dx^{\gamma_i} \wedge d\dot{x}^{\delta_1} \wedge \dots \wedge d\dot{x}^{\delta_{p-i}}$

$$\begin{aligned} d\omega = & \partial_{\beta} a_{\alpha_1 \dots \alpha_p} dx^{\beta} \wedge dx^{\alpha_1} \wedge \dots \wedge dx^{\alpha_p} + \partial_{\beta} b_{\alpha_1 \dots \alpha_p} dx^{\beta} \wedge d\dot{x}^{\alpha_1} \wedge \dots \wedge d\dot{x}^{\alpha_p} + \\ & + \sum_i \partial_{\beta} c_{\gamma_1 \dots \gamma_i \delta_1 \dots \delta_{p-i}} dx^{\beta} \wedge dx^{\gamma_1} \wedge \dots \wedge dx^{\gamma_i} \wedge d\dot{x}^{\delta_1} \wedge \dots \wedge d\dot{x}^{\delta_{p-i}}. \end{aligned}$$

Ha  $\omega$   $\dot{x}$ -ban homogén  $k$ -ad rendű, akkor  $d\omega$  homogén  $k-1$ -ed rendű lesz.

*Állítás*

Ha  $\Phi$  félbázikus  $p$ -forma, melynek együtthatói  $\dot{x}$ -tól függetlenek, akkor  $d\Phi=0$ .

*Állítás*

$d\dot{x}=0$  minden esetben; ha  $\omega$  félbázikus,  $\dot{x}$ -ban homogén  $k$ -ad rendű  $p$ -forma, melyre  $d\omega=0$ , akkor  $\omega=d\Omega$ , speciálisan, ha  $p+k \neq 0$ , akkor

$$\Omega = d \left( \frac{\dot{x} \lrcorner \omega}{p+k} \right).$$

Speciálisan, ha  $\Lambda = a_{\alpha} dx^{\alpha}$  félbázikus, homogén  $0$ -ad rendű  $1$ -forma  $TM$ -en, akkor létezik pontosan egy  $\mathcal{L}$  homogén  $1$ -ső rendű függvény  $TM$ -en, hogy

$$\Lambda = d\mathcal{L}.$$

Az  $\mathcal{L}$  alakja:

$$\mathcal{L}(x, \dot{x}) = a_{\alpha}(x, \dot{x}) \dot{x}^{\alpha}.$$

*Tétel (Klein)*

Ha  $\Sigma$  homogén  $0$ -ad rendű,  $d$ -zárt (azaz  $d\Sigma=0$ ),  $d$ -zárt (azaz  $d\Sigma=0$ )  $2$ -forma  $TM$ -en, akkor

$$(*) \quad \Sigma = dd\mathcal{L},$$

ahol  $\mathcal{L}$  homogén  $1$ -ső rendű függvény  $TM$ -en.

(\*) általános megoldása:

$$\mathcal{L}'(x, \dot{x}) = \mathcal{L}(x, \dot{x}) + \partial_{\alpha} f(x) \cdot \dot{x}^{\alpha},$$

ahol  $f: M \rightarrow \mathbb{R}$  tetszőleges függvény.

*Tétel (Klein)*

Ha  $\Sigma$  az  $E$ -n definiált, szubreguláris, zárt  $2$ -forma, akkor az  $y \rightarrow \text{Ker } \Sigma_y$  altérmező integrálsokaságait  $M$ -re vetítve pontosan akkor kapunk  $M$ -beli görbéket, ha  $d\Sigma=0$ .

*Tétel (Klein)*

Egy  $\Lambda$  az  $E$ -n definiált, szubreguláris, félbázikus  $1$ -forma által meghatározott variációs probléma általánosított megoldáslevelei pontosan akkor adnak az  $M$ -re vetítve egy-egy görbét, ha  $d\Lambda=0$ .

# A FERROMÁGNESES DOMÉNSZERKEZET KÖZVETLEN MEGFIGYELÉSE Fe-3% Si TRANSZFORMÁTORLEMEZEN\*

SÁRAY ISTVÁN  
Általános Fizika Tanszék, ELTE

## TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés .....	182
2. A ferromágneses anyag kontinuum elmélete .....	182
2.1. Alapvető kölcsönhatások a ferromágneses anyagban és a fenomenológiai leírásmód .....	182
2.2. A kölcsönhatásokat leíró energiakifejezések .....	183
2.3. Mikromágneses egyenletek .....	187
3. Doménelmélet .....	188
3.1. A doménszerkezetet megszabó tényezők .....	189
3.1.1. Magnetosztatikus energia .....	189
3.1.2. Anizotrópia energia .....	190
3.1.3. Rugalmas energia .....	191
3.1.4. A doménfal .....	192
3.2. Egyszerű doménszerkezet típusok vékony lemezanyagokon, külső mágneses tér nélkül .....	195
3.2.1. A felület (100) sík .....	196
3.2.2. A felület (110) sík .....	197
3.2.3. A felület nem tartalmaz könnyű mágnesezési irányt .....	198
3.3. A külső mágneses tér hatása .....	200
3.4. Külső rugalmas feszültségek hatása .....	202
3.5. Belső feszültségek hatása .....	205
3.6. A megengedett doménszerkezetek szabályai Fe-3 % Si-ben .....	205
4. A doménszerkezet megfigyelésének módszerei .....	205
4.1. Bitter-technika .....	206
4.2. Kerr-technika .....	207
5. Saját vizsgálatok vas-szilícium transzformátor- és dinamólemezek doménszerkezetére és mágneses tulajdonságaira vonatkozóan .....	208
5.1. A kísérleti technika leírása .....	208
5.2. Megfigyelt Bitter-ábrák .....	209
5.2.1. Lágy állapotú kockatextúrás mágnesszalagok lemágnesezett állapotban .....	209
5.2.2. Lágy állapotú, Goss-textúrás transzformátorlemezek lemágnesezett állapotban .....	210
5.2.3. Különleges konfigurációk lágy állapotú polikristályos transzformátorlemezen .....	211
5.2.4. Lágy állapotú, polikristályos lemezek vizsgálata külső mágneses térben .....	212
5.2.5. Külső rugalmas feszültségek hatása a doménszerkezetekre lágy állapotú lemezen .....	213
5.2.6. Az inhomogén képlékeny alakítás következményei a transzformátorlemez doménszerkezetén .....	213
5.3. A kivágás műveletének hatása a transzformátor- és dinamólemezek doménszerkezetére .....	215
5.4. Dinamólemezek mágneses paramétereinek változása a kivágás műveletének hatására .....	217
5.5. A Bitter-ábrák és a feszültségállapot .....	221
6. Összefoglalás, konklúzió .....	222
Irodalomjegyzék .....	223

\* Egyetemi doktori értekezés, 1978. Érkezett 1979. jan. 10.



## 1. Bevezetés

A ferromágneses anyagok doménszerkezete és mágneses tulajdonságai között szoros kapcsolat áll fenn [1, 2]. Számos megfigyelés mutatja, hogy ha külső behatás következtében megváltozik a mágnesezési görbe, akkor legtöbbször látható módon megváltozik a doménszerkezet is. A doménszerkezet közvetlen megfigyelési módszerekkel való kísérleti vizsgálata ezért értékes adatokat szolgáltat a mágneses tulajdonságokra vonatkozólag.

E dolgozatban részletesen megvizsgáljuk a doménszerkezet jellegzetességeit és különböző paraméterek doménszerkezetre gyakorolt hatását. Ezeket az ismereteket alkalmazzuk egy konkrét feladat megoldására. Megvizsgáljuk, hogy a mágneses anyagok technológiájának egy fontos művelete, a vasmaglemez kivágása milyen mértékben változtatja meg a doménszerkezetet és ezzel a mágneses tulajdonságokat.

## 2. A ferromágneses anyag kontinuum elmélete

### 2.1. Alapvető kölcsönhatások a ferromágneses anyagban és a fenomenológiai leírasmód

A ferromágneses anyagot úgy tekintjük, mint a ferromágneses anyag atomjaihoz kötött többé-kevésbé rendezett spinrácsot [3, 4]. A spineket érintő egyes kölcsönhatások közül a legerősebb a kicserélődési kölcsönhatás és a rács termikus mozgásának a hatása. E két alap kölcsönhatás figyelembevétele már elvezet a rendezett spinrácsok létezésének elméleti magyarázatához, ugyanis durván azt mondhatjuk, hogy ha a kicserélődési kölcsönhatás a spinek között erősebb mint a kristályrács termikus mozgásából származó, a rendezett beállítást szétzilálni igyekvő erő, akkor kialakul a ferromágneses rend.

A spinekre ható egyéb erők ugyan sokkal gyengébbek mint az említett két hatás, és csak módosító befolyással vannak a rendezett beállásra, mégis lényeges szerepet játszanak a ferromágneses jelenségek megértésében. Ezek az erők a mágneses dipól–dipól erők, a spin-pálya erők, a mágneses kvadrupól, és a magasabb rendű momentumoktól származó erők. Erőhatás származik még a kicserélődési kölcsönhatás megváltozásából akkor, ha a szomszédos spinek nem pontosan párhuzamosak. Fellépnek továbbá a rács rugalmas deformációjával kapcsolatos „magnetostriktív” erők is. E két utóbbi erő tulajdonképpen már benne van a fent felsorolt hatások valamelyikében, de fontosságuk miatt külön kiemeltük őket.

A ferromágneses szerkezetek tanulmányozásának legszigorúbb módja az volna, hogy ezekből az atomi szintű alapkölcsönhatásokból kiindulva statisztikus fizikai módszerekkel határozzuk meg a mágneses szerkezeteket. Ezen a módon mindezt idáig csak abban a legegyszerűbb esetben sikerült célt érni, amikor csupán a kicserélődési és a termikus mozgásokat vették figyelembe. Teljesen kivitelezhetetlennek látszik azonban ez a módszer akkor, amikor pl. dipól–dipól kölcsönhatásokat is figyelembe akarunk venni. Közelítésekkel kell élnünk tehát, mint a legtöbb szilárdtestfizikai problémánál.

A mágneses mikroszerkezet leírására széles körben alkalmazható közelítő elmélet a mikromágneses *kontinuum elmélet*. A kontinuum leírasmód alkalmazhatóságának feltétele, hogy a spinek beállása helyről helyre, rácsponttól rácspontra menve



viszonylag lassan változzon, azaz a szomszédos spinek közel paralel álljanak. Ez akkor valósul meg, ha a spinek párhuzamos beállítását zavaró hatások nem túl rövid hatótávolságúak. Ilyen pl. diszlokációk jelenlétével járó perturbáció [5].

Nem alkalmazható viszont az elmélet a ponthibáktól, a rétegződési hibáktól, a ferromágneses ötvözetekben fellépő atomi rendeződési hibákból származó spin-perturbációk esetében, amelyek néhány rácsállandón belüli nagy változásokat okoznak. Nem alkalmazható a kontinuumelmélet továbbá a különösen nagy anizotrópiájú keménymágneses anyagoknál sem, mert itt a különbözőképpen mágnesezett szomszédos tartományok között a spinátfordulás néhány rácsállandón belül történik [5].

A ferromágneses kontinuum elmélet kiinduló pontja az, hogy létezik az anyagban egy spontán mágneses rendezettség, amelyet az  $\mathbf{I}(r, t)$  mágneses momentum-sűrűség vektor függvénnyel írhatunk le. Ez a momentumsűrűség vektor — a közönséges  $\rho(r)$  tömegsűrűség függvénnyel analóg módon — egy makroszkopikusan kicsiny, de atomi léptékben mérve elég nagy, sok rácsállandóra kiterjedő térfogatra vett átlagolás eredménye. A kontinuum elmélet alkalmazhatóságának említett korlátai ezzel a követelménnyel függnek össze. Az  $\mathbf{I}$  vektor abszolút értéke,  $I_s(T)$ , jó közelítéssel csak a hőmérséklet függvénye, tehát  $\mathbf{I}$  a mágnesezési folyamatban csak az irányát változtatja [3—6].

A ferromágneses anyag kontinuum elmélete fenomenologikus elmélet. Ez azt jelenti, hogy a kölcsönhatások alaptípusait nem fizikai eredetük, hanem matematikai alakjuk szerint osztályozzuk. A kölcsönhatást leíró kifejezések levezetésénél a következő eljárást alkalmazhatjuk. Először megállapítjuk, hogy azok milyen változók függvényei lehetnek, majd a feltételezett változók szerinti sorfejtésből az első néhány tagot hagyjuk meg. Ezután a sorfejtésben fellépő konstansok számát kristályszimmetria megfontolásokkal lecsökkentjük néhány paraméterre, amit kísérleti adatokból határozhatunk meg számszerűen.

A kölcsönhatások fenomenológiai leírására több egyenértékű módszer ismeretes. Jellemezhetjük a kölcsönhatásokat effektív mágneses térrel, vagy forgatónyomaték sűrűség dimenziójú vektortérrel is. Matematikailag legkényelmesebb és ezért legáltalánosabban alkalmazott eljárás azonban az energiakifejezések használata. A különféle módszerekről részletes áttekintést adnak Brown monográfiái [3, 4].

## 2.2. A kölcsönhatásokat leíró energiakifejezések

Nem foglalkozunk részletesebben a fenomenológiai módszerrel és az energiakifejezések származtatásának leírásával, e tekintetben az irodalomra utalunk [3, 4, 6, 7].

A szomszédos mágneses momentumokat egymással párhuzamosra állító kicserélődési kölcsönhatási energia akkor a legkisebb, ha az összes spin azonos irányban áll. Az elemi momentumoknak a párhuzamos beállástól való eltérése energiatöbbletet okoz. Ezt az energiatöbbletet a kontinuum elméletben úgy írhatjuk le, mint a mágneses intenzitásvektor irányát megszabó  $\alpha_i$  iránykoszinuszok parciális deriváltjainak kvadrátikus, pozitív definit kifejezését. Köbös kristályokban a kicserélődési többlet energiasűrűség tehát:

$$f_k = A \sum_{i=1}^3 (\nabla \alpha_i)^2. \quad (2.1)$$



Az  $A$  kicserélődési konstans nagyságrendje:  $10^{-6} - 10^{-7} \text{ ergcm}^{-1}$ . Az  $\alpha_i$  iránykoszinuszok itt, és a továbbiakban a köbös kristálytengelyekhez rögzített koordinátákra vonatkoznak.

Az anizotrópia energia az anizotrop kristályrács és a mágneses momentumok közti kölcsönhatást írja le. Mikroszkopikusan szemlélve ez a kölcsönhatás az elemi spinpálya kölcsönhatás és a mágneses kvadrupól kölcsönhatás eredménye. Köbös kristályoknál az anizotrópia energiasűrűség:

$$f'_a = K'_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_1^2\alpha_3^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2) + K_2\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2. \quad (2.2)$$

A  $K'_1$  és  $K_2$  konstansok függvényei a hőmérsékletnek, értékeik szobahőmérsékleten többnyire  $10^3 - 10^7 \text{ ergcm}^{-3}$  nagyságrendek között vannak a különböző anyagok esetében. Azokat az irányokat, amelyekben ez az energiasűrűség minimális, könnyű mágnesezési irányoknak nevezzük.

A szórt-tér energia a dipól—dipól kölcsönhatásai energiának az a része, amely a nem kompenzált mágneses pólusoktól ered. Ha az  $\mathbf{I}$  mágneses intenzitás vonalai az anyagban mindenütt zártak, akkor a szórt-tér zérus, és a szórttér-energia is az. A Maxwell-egyenletek szerint  $\text{div } \mathbf{B} = 0$ , azaz

$$\text{div } \mathbf{H}_s = -4\pi \text{div } \mathbf{I}. \quad (2.3)$$

Ha tehát a mágneses intenzitás nem divergenciamentes, akkor ott a mágneses térnek forrása van; ez a belső eredetű  $\mathbf{H}_s$  mágneses tér a szórt-tér, amelyben a dipóloknak potenciális energiájuk van. A szórt-tér magnetosztatikai energiája a kristály teljes térfogatára:

$$F_s = -(1/2) \int \mathbf{H}_s \mathbf{I} dV = 1/8\pi \int H_s^2 \cdot dV, \quad (2.4)$$

ahol a második integrál az egész térre kiterjed.

Az eddig felírt energiafajtákhoz hasonlóan, formálisan a szórt-tér energia is kifejezhető energiasűrűségként:

$$f_s = -\mathbf{H}_s \mathbf{I}, \quad (2.5)$$

azonban  $\mathbf{H}_s$  értékét  $\mathbf{I}$ -nek a test összes többi pontjában felvett értékei ismeretében tudjuk csak meghatározni. A  $\mathbf{H}_s$  szórt-tér meghatározásához célszerű bevezetni az  $U$  magnetosztatikus potenciált, amellyel

$$\mathbf{H}_s = -\nabla U. \quad (2.6)$$

(2.6) felhasználásával (2.3)-ból kapjuk a

$$\Delta U = 4\pi \text{div } \mathbf{I} \quad (2.7)$$

Poisson-egyenletet, amelyet a

$$\nabla_n U_b - \nabla_n U_k = 4\pi \mathbf{I}_n \quad (2.8)$$

és az

$$U_b = U_k \quad (2.8b)$$

határfeltételekkel kell megoldani. (2.8)-ban  $\mathbf{I}_n$  a mágnesezettség vektorának normális komponense a határfelületen,  $U_b$  és  $U_k$  pedig a potenciál értéke a határfelület belső, illetve külső oldalán.

Külső mágneses térben a ferromágneses anyag magnetosztatikus potenciállal rendelkezik, amely

$$f_h = -\mathbf{H}_0 \mathbf{I}. \quad (2.9)$$

Figyelembe kell vennünk még, hogy a kristályrács rugalmas torzulásokat is szenvedhet, aminek következtében rugalmas energijárulék is fellép. Egy köbös, ferromágneses kristály rugalmas energiasűrűsége az  $e_{ij}$  deformációmennyiségek függvényében [7]:

$$\begin{aligned} f_r' = & b_1(\alpha_1^2 e_{11} + \alpha_2^2 e_{22} + \alpha_3^2 e_{33}) + \\ & + b_2(\alpha_1 \alpha_2 e_{12} + \alpha_2 \alpha_3 e_{23} + \alpha_3 \alpha_1 e_{31}) + \\ & + (1/2)c_1(e_{11}^2 + e_{22}^2 + e_{33}^2) + \\ & + c_2(e_{11}e_{22} + e_{22}e_{33} + e_{33}e_{11}) + \\ & + (1/2)c_3(e_{12}^2 + e_{23}^2 + e_{31}^2), \end{aligned} \quad (2.10)$$

ahol  $b_1$  és  $b_2$  a magnetoelasztikus csatolási állandók, a  $c_1, c_2, c_3$  konstansok pedig a köbös rugalmassági modulusok. (2.10) abban különbözik a nem ferromágneses köbös kristály rugalmas energiájától, hogy benne a kvadrátikus tagokon kívül az  $e_{ij}$  deformációmennyiségekben lineáris tagok is vannak, és ezek függenek a mágnesezettség irányától is. Emiatt a ferromágneses kristály energiája nem az  $\mathbf{e}=0$  deformációknál veszi fel a minimális értékét, hanem külső erők hiányában is, a mágnesezettség irányától függően, spontán deformálódik. Az egyensúlyi deformációkat a mágnesezettség eloszlásának és az esetleges külső vagy belső, maradó feszültségek ismeretében tudjuk kiszámolni.

Legyen először az  $\mathbf{I}(\mathbf{r})$  mágnesezettség mindenütt azonos irányú, és legyen a feszültség  $\boldsymbol{\sigma}=0$ . Az egyensúlyi deformációkat a

$$\partial f_r' / \partial e_{ij} = 0 \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (2.11)$$

feltételből kapjuk [7]:

$$\begin{aligned} e_{ii}^m = & b_1 [c_2 - \alpha_i^2 (c_1 + 2c_2)] / [(c_1 - c_2)(c_1 + 2c_2)] \\ e_{ij}^m = & -b_2 \alpha_i \alpha_j / c_3 \quad i \neq j. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Beírva (2.12) megoldásokat a rugalmas energia (2.10) kifejezésébe az

$$f_r'^m = [b_1^2 / (c_1 - c_2) - 2b_2^2 / c_3] (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) \quad (2.13)$$

kifejezés adódik, amelyet szabad tágulási energiának neveznek. (2.13) ugyanúgy függ az iránykoszinuszoktól, mint az anizotrópia energia, ezért az  $f_r'^m$  szabad tágulási energia a (2.2) kristályanizotrópia energia részének is tekinthető, és így

$$f_a = f_a' + f_r'^m = K_1 (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) + K_2 \alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3^2, \quad (2.14)$$

ahol  $K_1 = K_1' + b_1^2 / (c_1 - c_2) - 2b_2^2 / c_3$ .

$f_r'^m$ -et az anizotrópiaenergia magnetostríktív részének is szokták nevezni.



Ha most a mágnesezés továbbra is egyirányú a kristályban, de  $\sigma^k$  külső feszültség is van jelen, akkor az egyensúlyi deformációkat az

$$f_r^* = f_r' + \sigma_{ij}^k \cdot e_{ij}$$

függvény minimuma határozza meg [8].

A (2.11) alapján adódó megoldásokat most

$$\mathbf{e} = \mathbf{e}^m + \mathbf{e}^\sigma \quad (2.15)$$

alakban írhatók, ahol  $\mathbf{e}^m$  (2.12)-vel azonos,  $\mathbf{e}^\sigma$  pedig a Hooke törvényből adódóan:

$$e_{ii}^\sigma = \sigma_{ii}/(c_1 - c_2) - [c_2/(c_1 - c_2)(c_1 + 2c_3)](\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})$$

$$e_{ij}^\sigma = \sigma_{ij}/2c_3 \quad i \neq j \quad (2.16)$$

(2.15)-öt (2.16)-tal beírva (2.10)-be az energiasűrűség kifejezésében (2.13) mellett megjelenik az

$$f_r^\sigma = [b_1/(c_1 - c_2)](\sigma_{11}^k \alpha_1^2 + \sigma_{22}^k \alpha_2^2 + \sigma_{33}^k \alpha_3^2) +$$

$$+ (b_2/2c_3)(\sigma_{12}^k \alpha_1 \alpha_2 + \sigma_{23}^k \alpha_2 \alpha_3 + \sigma_{31}^k \alpha_3 \alpha_1) \quad (2.17)$$

magnetoelasztikus csatolási energia is, amelyen keresztül a külső feszültség hatással van a mágnesezés eloszlására.

Abban az esetben, amikor sem kívülről ráadott, sem a kristályhibáktól eredő maradó feszültségek nincsenek jelen, viszont az  $\mathbf{I}$  mágnesezés iránya helyről helyre változhat, az egyensúly szükséges feltétele (2.11) helyett az, hogy egyensúlyi állapotban az egész kristály  $F_r'$  teljes rugalmas energiája legyen minimális [6], azaz:

$$\delta_e F_r' = \delta_e \int f_r' dV = 0, \quad (2.18)$$

ahol az integrálás a kristály egész térfogatára terjed ki, a  $\delta_e$  pedig az  $e_{ij}$  deformációk szerinti variációt jelenti rögzített  $\alpha_i$ -knél a

$$\nabla \times \mathbf{e} \times \nabla = 0 \quad (2.19)$$

kompatibilitási feltétel, mint mellékfeltétel mellett. (2.19) azt jelenti, hogy az  $\mathbf{e}$  deformációs térnek egyértékű elmozdulástérből kell leszármaztathatónak lenni [9]. Bebizonyítható [6], hogy a fenti esetben is lehetséges a deformációs tér (2.15)-höz hasonló felbontása, azaz:

$$\mathbf{e} = \mathbf{e}^m + \mathbf{e}^{\text{extra}}, \quad (2.20)$$

ahol  $\mathbf{e}^m$  ismét (2.12)-vel azonos,  $\mathbf{e}^{\text{extra}}$  viszont a kristály különböző irányban mágnesezett szomszédos tartományainak szabad magnetostrikciós alakváltozását gátló extrafeszültségek következménye. Mivel  $\mathbf{e}^m$  az iránykoszinuszok ismeretében előre megadható,  $\mathbf{e}^{\text{extra}}$  meghatározása éppen (2.19)-ből történhet (2.20) felhasználásával.

Ha a kapott  $\mathbf{e}$  egyensúlyi deformációkkal kiszámítjuk a (2.10) kristály energiasűrűséget, akkor az így adódó kifejezésben a (2.13) szabad tágulási energia mellett megjelenik egy az említett extrafeszültségek fellépésével kapcsolatos energiát is, az  $f_r^{\text{extra}}$  magnetostrikciós extraenergia [6].  $f_r^{\text{extra}}$  tehát a tisztán magnetostrikciós eredetű torzulásokat tartalmazó kristály többletenergiája a mágnesezettség inhomogén beállása miatt.

Általános esetben felléphet még belső forrásból, pl. diszlokációktól eredő, nem magnetostrikciós természetű belső  $\sigma^b$  feszültség és ennek megfelelő  $e^b$  deformáció is. Ekkor természetesen (2.19) már nem érvényes. Mivel azonban rendszerint:

$$\sigma^b \gg \sigma^{\text{extra}}, \quad (2.21)$$

ezért a magnetostrikciós kölcsönhatás  $e^b$ -re gyakorolt hatását elhanyagolhatjuk [5, 6], és így  $e^{\text{extra}}$  számítása jó közelítéssel továbbra is (2.19)-ből történhet, míg  $\sigma^b$ -t és  $e^b$ -t a mágneses állapotól függetlenül adottnak vehetjük.

Az egyensúlyi mágneses állapot kialakulásába a rugalmas energiának csak az a része szól bele, amely függ az iránykoszinuszoktól. Ilyen az  $f_r^{\text{extra}}$ , és ilyen (2.17) is, ahol azonban  $\sigma^k$  helyébe

$$\sigma = \sigma^k + \sigma^b \quad (2.22)$$

-t kell írunk [8]. Tehát az  $f_r'$  rugalmas potenciál iránykoszinuszoktól függő része (2.14), (2.17) és (2.21) figyelembevételével végül:

$$f_r = f_r^{\sigma} + f_r^{\text{extra}}. \quad (2.23)$$

A (2.1)–(2.5) és (2.9) kifejezésekkel kapcsolatban feltételeztük, hogy a rugalmas deformáció jelenléte nem befolyásolja ezeket, ami — mint Brown rámutatott — nem teljesen igaz [4]. A szükséges korrekciók azonban kicsik és a továbbiakban eltekintünk tőlük.

### 2.3. Mikromágneses egyenletek

A ferromágneses anyag kontinuum mechanikájának egyik feladata, hogy megadja az adott feltételek mellett lehetséges egyensúlyi  $\mathbf{I}(r)$  mágneses momentum-sűrűség eloszlásokat az anyagban. A termodinamika szerint a környezetével hőcserét folytató, és munkavégzés szempontjából is kapcsolatban levő rendszer szabad entalpiájának egyensúlyban minimálisnak kell lennie.

Ennek szükséges feltétele, hogy a szabad entalpiafüggvény iránykoszinuszok szerinti első variációja eltűnjön, azaz

$$\delta_\alpha G = \delta_\alpha \left[ \int f dV - TS \right] = 0, \quad (2.24)$$

ahol

$$f = f_k + f_a + f_s + f_h + f_r, \quad (2.25)$$

és a  $\delta_\alpha$  szimbólum az  $\alpha_i$  iránykoszinuszok szerinti variációt jelenti a

$$\sum \alpha_i^2 = 1 \quad (2.26)$$

mellékfeltétel mellett [3–6]. Az integrálás a kristály egész térfogatára terjed ki. Az  $S$  entrópia az iránykoszinuszoktól csak gyengén függ, ezért a variációképzésből elhagyható. Tehát:

$$\delta_\alpha \int f dV = 0. \quad (2.27)$$

A (2.27) variációs feladat a Brown-féle mikromágneses egyenletekhez vezet [3–6], amelyet tömören és szemléletes jelentéssel az alábbi vektoregyenlet alakjában írhatunk fel:

$$\mathbf{I}(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}_{\text{eff}} = 0. \quad (2.28)$$



Itt bevezettük a  $\mathbf{H}_{\text{eff}}$  effektív mágneses tér jelölést az alábbi definícióval:

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = (2A/I_s^2)\Delta\mathbf{I} + \mathbf{H}_a + \mathbf{H}_s + \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_r^\sigma + \mathbf{H}_r^{\text{extra}},$$

ahol:

$$(\mathbf{H}_a)_i = (1/I_s)(\partial/\partial\alpha_i)f_a \quad (2.29a)$$

$$(\mathbf{H}_r)_i = (1/I_s)(\partial/\partial\alpha_i)f_r \quad (2.29b)$$

$$(\mathbf{H}_r^{\text{extra}})_i = (1/I_s)(\partial/\partial\alpha_i)f_r^{\text{extra}}. \quad (2.29c)$$

A (2.28) mikromágneses egyenletek szemléletes jelentése az, hogy a mágneses momentumokra ható összes — belső és külső, mágneses és nem mágneses — hatást leíró  $\mathbf{H}_{\text{eff}}$  effektív mágneses térnek, egyensúly esetén, mindenütt párhuzamosnak kell lenni a helyi mágneses intenzitásvektorral.

Az egyensúlyi mágneses szerkezet meghatározásához a mikromágneses egyenletekkel egyidejűleg meg kell oldani a  $\mathbf{H}_s$  szórt teret megadó (2.7) Laplace-egyenletet, továbbá meg kell határozni a (2.15), ill. (2.20) egyensúlyi deformációkat is a (2.19) kompatibilitási feltétel figyelembevételével.

### 3. Doménelmélet

Az előző szakaszban felírt mikromágneses egyenleteket a valóságos 3 dimenziós problémáknál csak nagyon durva közelítésekkel oldották meg eddig. A fő nehézség az egyenletek nem linearitása és a nem lokális magnetosztatikus kölcsönhatásból származó követelmények teljesítése.

A közelítések rendszerint abból a kísérleti tapasztalattal is alátámasztott feltételezésből indulnak ki, hogy a mágnesezési vektor közel egyirányú a nagyszámú 3 dimenziós, doménnek nevezett tartomány belsejében. A szomszédos, különbözőképpen mágnesezett doméneket viszonylag vékony átmeneti tartomány, doménfal választja el egymástól, amelyen belül a mágnesezés irányának változása viszonylag „gyors”.

A mikromágneses egyenletek segítségével meghatározhatjuk a falak szerkezetét, tulajdonságait, energiáját, és ha ezeket adottnak vesszük, azaz feltételezzük, hogy magát ezt a falat a kristály többi részében bekövetkező változások nem befolyásolják, akkor a falak megfelelő elhelyezésével közelítőleg teljesíthetjük a termodinamikai egyensúly követelményeit.

A mágneses intenzitás ilyen „doménszerkezet”-szerű eloszlását nagy vonásokban a következőképpen érthetjük meg. A kicserélődési kölcsönhatás igyekszik a szomszédos spineket párhuzamosan beállítani. A kicserélődési erők azonban rövid hatótávolságúak, és csupán  $I$  irányváltozási „sebességét” tudják megszabni. A hosszú hatótávolságú belső magnetosztatikai erők azonban akadályozzák a homogén beállást, mivel ez esetben bármely véges testnél a határokon fellépő pólusok olyan belső teret hoznának létre, amely ellentétes  $\mathbf{I}$ -vel (2.3) miatt. A magnetosztatikai erők sokkal gyengébbek ugyan, mint a kicserélődési erők, tehát nem tudják jelentősen befolyásolni a spinek lokális párhuzamos beállását, de ha a minta elég nagy, akkor ki tudnak választani egy olyan nem homogén eloszlást, amelyik legalább közelítőleg elkerüli a pólusok kialakulását. Az anizotrópia erők ezután abban jelentkeznek, hogy kiszélesítik azokat a tartományokat, amelyekben a mágnesezés bizonyos kitüntetett

irányokban áll, és összeszűkítik az egyéb irányokban mágnesezett tartományokat úgy, hogy az előbbieket közel egyformán mágnesezett „domének” lesznek, az utóbbiak pedig vékony határrétegek, falak.

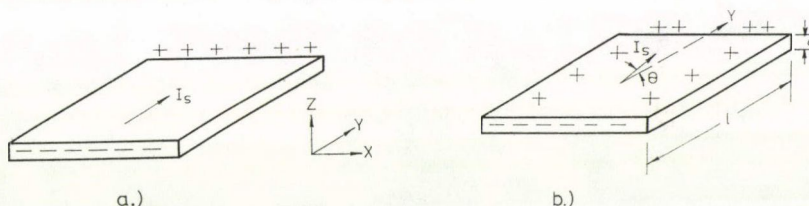
Ebből a fejtegetésből az is látszik azonban, hogy a mágnesezés ilyen doménszerkezetszerű eloszlása korántsem általános minden ferromágneses anyagra és minden körülmények között. Ha pl. a minta méretei olyan kicsik (vasnál kb.  $2 \times 10^{-6}$  cm), hogy a spinek átfordulása a pólus elkerülése érdekében túlságosan nagy  $\nabla \alpha_i$  gradiensekkel járna, akkor itt a kicserélődési erők rövid távon belüli domináló hatása fog érvényesülni és homogén  $\mathbf{I}(\mathbf{r})$  mágneses intenzitás eloszlás alakul ki. Olyan anyagok esetében pedig, amelyeknél az anizotrópia erők kicsik,  $\mathbf{I}$  csak lassan változik a hely függvényében és nem alakulnak ki vékony doménfalszerű képződmények.

A dolgozat tárgyát képező vizsgálatok vas-3% szilícium ötvözetben történtek, amelynél fennállnak a doménszerkezet kialakulásának előbb említett feltételei, és a továbbiak során is elsősorban erre az anyagra gondolunk.

### 3.1. A doménszerkezetet megszabó tényezők

#### 3.1.1. Magnetosztatikus energia

A „szabad” (=nem kompenzált) mágneses pólusok fellépésével kapcsolatos energia a (2.4) egyenlettel megadott szórt-tér energia vagy magnetosztatikus energia jelenti a fő hajtóerőt a domének kialakulására lágymágneses anyagokban. Tekintsük a 3.1.a ábrán rajzolt ferromágneses lemezt.



3.1. ábra

A lemez  $y$  irányban mágnesezett. Ebben az irányban a lemez végein pólusok keletkeznek. A pólusok mágneses tere ellentétes a mágnesezés vektorával, és közelítőleg arányos vele [7], azaz

$$\mathbf{H}_s = -N_y \mathbf{I}. \quad (3.1)$$

Itt  $N_y$  a lemágnesezési tényező  $y$  irányban, értéke 0 és  $4\pi$  között változik, amint a lemez hossza  $y$  irányban  $\infty$ -ról kb. zérusra csökken. Ezzel a szórt-tér energiasűrűség (2.5) alapján

$$f_s = (1/2) N_y I_s^2. \quad (3.2)$$

$I_s$  értéke Fe-3% Si-nél 1560 gauss [10].

A (3.1) szórt-tér és a (3.2) potenciál a telítésben levő lemezre rendkívül nagy még akkor is, ha a lemez végeinek területe viszonylag kicsi és a lemez hosszú. Ha pl.  $d/l \sim 200$ , akkor  $N_y = 0,05$ , így  $H_s \sim 80$  Oe és  $f_s \sim 0,7 \times 10^5$  ergcm $^{-3}$ .



Ha az  $\mathbf{I}$  vektor a 3.1b ábrának megfelelően  $\Theta = 4^\circ$  szöggel hajlik az  $y$  tengelyhez, akkor a lemez alsó és felső lapján is megjelennek pólusok, és ezek magnetosztatikus energiája hozzáadódik a végeken levő pólusok energiájához. A szórt-térerősség komponensei ebben az esetben:

$$\text{és} \quad (\mathbf{H}_s)_y = -N_y I_y = -N_y \cdot I_s \cdot \cos \Theta, \quad (3.3)$$

$$\text{Ezekkel} \quad (\mathbf{H}_s)_z = -N_z I_z = -N_z \cdot I_s \cdot \sin \Theta.$$

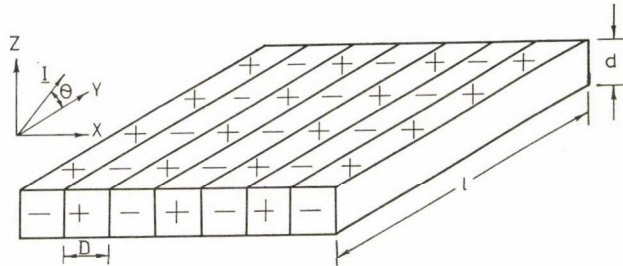
$$\text{és} \quad (f_s)_y = (1/2) \cdot N_y I_s^2 \cdot \cos^2 \Theta$$

$$(f_s)_z = (1/2) N_z \cdot I_s^2 \sin^2 \Theta. \quad (3.4)$$

(3.4)-ben  $(f_s)_y$  és  $(f_s)_z$  természetesen nem vektorkomponenseket jelöl, hanem az indexek a magnetosztatikai energia forrásaira utalnak. Kiszámítva (3.4)-et azt kapjuk, hogy miközben  $\Theta$  zérusról  $4^\circ$ -ra nő  $(f_s)_y$  gyakorlatilag nem változik,  $(f_s)_z$  viszont zérusról  $(f_s)_z \sim (f_s)_y$ -ra növekszik.

Ennek az eléggé meglepő ténynek az az oka, hogy  $N_z \sim 4\pi \gg N_y$ .

A szórt-tér energia mindkét esetben erősen lecsökken, ha a 3.2. ábra szerinti sokdoménű szerkezet alakul ki.



3.2. ábra

A 3.2. ábrának megfelelő,  $x$  irányban periodikusan ismétlődő szerkezet magnetosztatikai energiája felületegységenként *Kittel* szerint [7]:

$$E'_s = 0,8525 \cdot D \cdot I_s^2 \cdot \cos^2 \Theta \quad (3.5)$$

az alsó és felső felületre külön-külön, ha ezek nincsenek túlságosan közel egymáshoz, azaz  $D/d \ll 1$ . *Goodenough* [11] és *Spáček* [12] számos, a doménelméletben gyakran vizsgált szerkezetre számította ki a magnetosztatikus energiát.

### 3.1.2. Anizotrópia energia

A köbös anyagokra felírt (2.2) és (2.14) anizotrópia energia kifejezésben szereplő  $\alpha_i$  iránykoszinuszok az  $\langle 100 \rangle$  köbös kristálytengelyekre vannak vonatkoztatva.  $K_1$  és  $K_2$  az első, illetve a másodrendű anizotrópia konstansok. Ezek előjele és egymáshoz viszonyított értéke határozza meg a könnyű mágnesezési irányokat. A Fe-3% Si ötvözetben  $K_1$  nagy és pozitív,  $K_2$  pedig rendszerint elhanyagolhatóan kicsi, ezért itt a könnyű mágnesezési irányok az  $\langle 100 \rangle$  köbös tengelyekkel esnek egybe. Ezekben

az irányokban  $f_a=0$ .  $K_1$  számértéke Fe-3% Si-nél  $2,86 \cdot 10^5$  ergcm<sup>-3</sup> [10]. Ezzel az értékkel számolva az anizotrópiaenergiához tartozó (2.29a) effektív mágneses tér  $H_a=2K_1/I_s \sim 350$  Oe nagyságrendű.

$H_a$  nagy értéke az Fe-3%Si ötvözetben azt eredményezi, hogy a mágnesezési vektor egészen a telítés folyamatának a kezdetéig mindig valamelyik könnyű mágnesezési irányban áll. Ez a megszorítás nagymértékben leegyszerűsíti a doménszerkezetek elméleti és kísérleti vizsgálatát ebben az anyagban.

### 3.1.3. Rugalmas energia

A rugalmas energia becsléséhez ismerni kell  $b_1$  és  $b_2$  csatolási állandók értékét. Kísérletileg a (2.12) spontán deformációk mérésével lenne lehetséges  $b_1$  és  $b_2$  meghatározása. A deformációmennyiségek definíciója alapján könnyen belátható, hogy ha egy kristály  $e_{ij}$  homogén alakváltozással rendelkezik, akkor az  $\alpha_i$  iránykoszinuszokkal jellemzett irányban mérhető relatív hosszváltozása az alapállapothoz képest [7]:

$$\delta l/l = \sum_{i,j=1}^3 e_{ij} \beta_i \beta_j. \quad (3.6)$$

Beírva ide a (2.12) deformációkat kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \delta l/l = & -[b_1/(c_1 - c_2)](\alpha_1^2 \beta_1^2 + \alpha_2^2 \beta_2^2 + \alpha_3^2 \beta_3^2) - \\ & -(b_2/c_3)(\alpha_1 \alpha_2 \beta_1 \beta_2 + \alpha_2 \alpha_3 \beta_2 \beta_3 + \alpha_3 \alpha_1 \beta_3 \beta_1) + \\ & + 3c_2 b_1/(c_1 + 2c_2)(c_1 - c_2). \end{aligned} \quad (3.7)$$

A  $\delta l/l$  spontán méretváltozás közvetlenül nem mérhető, hiszen a nem mágneses alapállapot nem valósítható meg szobahőmérsékleten, azonban a mágnesezés irányváltozásakor észlelhető a  $\delta l/l$  értékek megváltozása. Legyen a mérés iránya  $\beta_1=1$ ,  $\beta_2=\beta_3=0$  értékekkel jellemezve. Ha a mágnesezés először  $\alpha_1=1$ ,  $\alpha_2=\alpha_3=0$  irányban van, akkor (3.7) szerint:

$$(\delta l/l)_1 = -b_1/(c_1 - c_2) + k.$$

Ha a mágnesezést átfordítjuk az  $\alpha_2=1$ ,  $\alpha_1=\alpha_3=0$  irányba, akkor

$$(\delta l/l)_2 = k = \text{állandó}.$$

A kísérletileg észlelhető különbség:

$$(\delta l/l)_2 - (\delta l/l)_1 = b_1/(c_1 - c_2).$$

Hasonlóan lenne mérhető  $b_2$  is. A  $b_1$  és  $b_2$  csatolási állandók helyett szokásos bevezetni a  $\lambda_{100}$  és  $\lambda_{111}$  köbös magnetostrikciós állandókat az alábbi definícióval:

$$\begin{aligned} \lambda_{100} &= -2b_1/3(c_1 - c_2) \\ \lambda_{111} &= -b_2/3c_3. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Fe-3% Si-re  $\lambda_{100}=23,7 \times 10^{-6}$  és  $\lambda_{111}=-4,1 \times 10^{-6}$ , a rugalmas állandók pedig  $c_1=$



$= 2,18 \times 10^{12} \text{ ergcm}^{-3}$ ,  $c_2 = 1,33 \times 10^{12} \text{ ergcm}^{-3}$ ,  $c_3 = 1,22 \times 10^{12} \text{ ergcm}^{-3}$ , [10]. A (2.17) magnetoelasztikus csatolási energia a (3.8) magnetostriktációs állandókkal kifejezve:

$$f_r^\sigma = -(3/2)\lambda_{100}(\sigma_{11}\alpha_1^2 + \sigma_{22}\alpha_2^2 + \sigma_{33}\alpha_3^2) - \\ - 3\lambda_{111}(\sigma_{12}\alpha_1\alpha_2 + \sigma_{23}\alpha_2\alpha_3 + \sigma_{31}\alpha_3\alpha_1). \quad (3.9)$$

Legyen a feszültség homogén, irányát pedig a  $\gamma_i$  iránykoszinuszokkal jellemezzük, azaz

$$\sigma_{ij} = \sigma \gamma_i \gamma_j, \quad (3.10)$$

akkor (3.9)

$$f_r^\sigma = -(3/2)\lambda_{100}\sigma(\alpha_1^2\gamma_1^2 + \alpha_2^2\gamma_2^2 + \alpha_3^2\gamma_3^2) - \\ - 3\lambda_{111}\sigma(\alpha_1\alpha_2\gamma_1\gamma_2 + \alpha_2\alpha_3\gamma_2\gamma_3 + \alpha_3\alpha_1\gamma_3\gamma_1)$$

alakú lesz. Álljon a mágnesezés valamelyik könnyű mágnesezési irányban, akkor (3.11) igen egyszerű alakot ölt:

$$f_r^\sigma = -(3/2)\lambda_{100}\sigma \cdot \cos^2 \Phi, \quad (3.12)$$

ahol  $\Phi$  a mágnesezés és a feszültség iránya közti szög.  $\Phi=0$  esetén  $10 \text{ kpm}^{-2}$  húzófeszültségnél  $f_r \sim -3,5 \times 10^4 \text{ ergcm}^{-3}$  és (2.29b) szerint  $H_r \sim 40 \text{ Oe}$ . A húzófeszültség iránya, vagy pedig a nyomófeszültségre merőleges irány tehát kedvező a mágnesezettség számára, azonban a fenti értékek jelentősen kisebbek a kristály természetes anizotrópiájánál, emiatt pl., ha a  $\sigma \sim 10 \text{ kpm}^{-2}$  húzófeszültség valamilyen ferde szöget zár be a kristálytengelyekkel, akkor a mágnesezés nem fordul be a feszültség irányába, hanem a feszültség irányához legközelebb eső könnyű irányba áll be. A külső és belső feszültségek tehát Fe-3% Si esetén a doméneket nem forgatják ki a könnyű irányokból, csupán egyik könnyű irányból átviszlik a másikba.

### 3.1.4. A doménfal

A domének belsejében **I** a könnyű mágnesezési irányban áll, és gradiensei is eltűnnek, tehát az  $f_a$  anizotrópia energia és az  $f_k$  kicserélődési energia zérus. A doménfalban azonban, ahol a spinek az egyik könnyű irányból a másikba átfordulnak, mindez nem érvényes. A spineknek irányt kell változtatniuk, de a változás módjára  $f_k$  és  $f_a$  ellentétes követelményeket szab ki; az előbbi a lassú, az utóbbi a minél gyorsabb átfordulásnál kisebb. Az optimális spinelrendeződést (2.28) egyenletek megoldásával kapjuk [6]. A doménfalat síknak tekintjük és megköveteljük, hogy a falban ne legyenek pólusok. Ez teljesül akkor, ha **I**-nek a fal síkjára merőleges komponense állandó, azaz

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{I} = I_s \cdot \cos \vartheta = \text{konst.} \quad (3.13)$$

Itt **n** a fal síkjának normálvektora,  $\vartheta$  pedig az **n** és az **I** vektorok közti szög. Az ilyen típusú átmenetet a könnyű mágnesezési irányok között Bloch-falnak nevezzük.

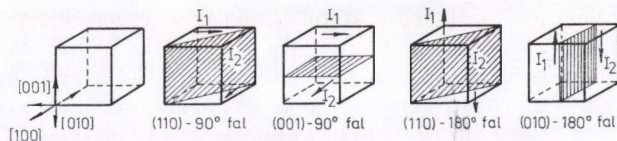
A Bloch-fal síkját az

$$\mathbf{n}(\mathbf{I}_1 - \mathbf{I}_2) = 0 \quad (3.14)$$

összefüggés határozza meg, ahol  $\mathbf{I}_1$  és  $\mathbf{I}_2$  a mágnesezésvektorok a szomszédos domé-

nekben. A Bloch-falak lehetnek  $90^\circ$ -osak vagy  $180^\circ$ -osak aszerint, hogy  $I_1$  és  $I_2$  mekkora szöget zár be egymással.

Néhány lehetséges Bloch-fal elhelyezkedést láthatunk a 3.3. ábrán.



3.3. ábra

A spinátfordulást jellemző két szög,  $\vartheta$  és  $\varphi$  közül  $\vartheta$  (3.13) értelmében állandó, az  $\mathbf{n}$  vektor körüli forgást leíró  $\varphi$  szög lehetséges változását pedig,  $180^\circ$ -os fal esetén, a 3.4. ábrán láthatjuk.

A Bloch-fal fontos jellemzői a  $\delta_B$  falvastagság és a fajlagos (egységnyi falfelületre vonatkoztatott)  $\gamma_B$  falenergia.  $\delta_B$  definícióját a 3.4. ábráról olvashatjuk le. Mivel  $\varphi$  aszimptotikusan közeledik zérushoz, illetve  $\pi$ -hez, a  $\varphi$  egyre csökkenő léptékű változását az inflexiós pontnak, (esetleg pontoknak) megfelelő, egyforma léptékű szögváltozásokkal helyettesítjük. Az effektív falvastagság tehát:

$$\delta_B = (\varphi_2 - \varphi_1)(dz/d\varphi)|_{\varphi_{\text{infl}}}. \quad (3.15)$$

A  $z$  falnormálissal egyirányú koordináta megadható az energiajárulékok ismeretében [6]:

$$\delta_B = \sqrt{A} \sin \vartheta_0 \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} d\varphi / \sqrt{f_B(\varphi) - f_B(\varphi_1)}, \quad (3.16)$$

ahol  $f_B = f_a + f_r$ .  $f_r$ -et elhanyagolva a doménfalvastagság (3.16) szerint nagyságrendileg

$$\delta_B \sim \pi \sqrt{A/K_1}, \quad (3.17)$$

ami Fe-3% Si esetében  $\sim 700 \text{ \AA}$ . Itt az  $A = 1,48 \times 10^{-6} \text{ ergcm}^{-1}$  értékkel számoltunk [10].

A doménfalenergia [6]:

$$\gamma_B = 2 \sqrt{A} \sin \vartheta_0 \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} d\varphi \sqrt{f_B(\varphi) - f_B(\varphi_1)}. \quad (3.18)$$

Amint az a (3.18)-ból látható, a falenergia függ a fal kristálytani orientációjától. Ezt a problémát Lilley [13], valamint Graham és Neurath vizsgálták részletesen [14].

A 3.5. ábrán feltüntettük a relatív falenergiát a forgatás szögének függvényében, midőn a  $180^\circ$ -os fal a  $[100]$  tengely körül, illetve a  $90^\circ$ -os fal az  $[110]$  tengely körül fordul el. A számításoknál elhanyagoltuk az  $f_r^\sigma$  és  $f_r^{\text{extra}}$  rugalmas energiatagokat.

A falak természetesen igyekeznek lehetőség szerint minimális energiával beállni egy lehetséges helyzetbe, egyensúly esetén. Figyelembe kell venni azonban, hogy nem a fajlagos falenergiának kell minimálisnak lennie, inkább a teljes falenergiának. (100) felületű kristályoknál tehát pl. a  $180^\circ$ -os falak várhatóan merőlegesek a felületre, de egy (110) felületű, a 3.6.a ábra szerinti kristálylemeznél a fal  $\omega = \pm 32^\circ$ -os szögbe állna be ( $\Theta = 45^\circ$ ) a felület normálisához.

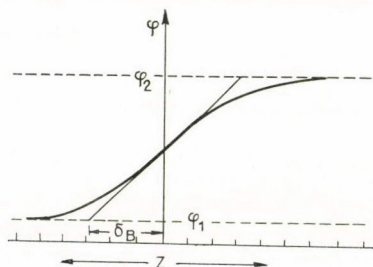


Mivel a teljes falenergia két különböző szögre azonos (pl.  $\omega_1 = +32^\circ$  és  $\omega_2 = -32^\circ$ ), valószínű, hogy a fal a kristály belsejében nem marad azonos síkban, hanem a két lehetséges beállítás között a 3.6.c ábra szerint váltakozik.

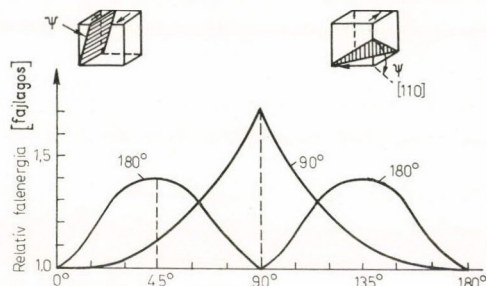
Graham és Neurath vizsgálták a feszültség hatását is. Megállapították, hogy egy  $y$  tengellyel párhuzamos feszültség a stabil beállítás szögét nagymértékben eltolhatja. Ha pl.  $f_r^s = 0,15 K_1$ , akkor a stabil orientáció szöge  $\omega = 20^\circ$ -ra csökken.

Még erősebben befolyásolják a feszültségek a  $90^\circ$ -os falak helyzetét. A fal jelenléte ugyanis a magnetostrikciós torzulások következtében belső feszültségeket hoz be a kristályba. Ha nincs doménfal, akkor a kristály szabadon deformálódhat (3.7.a ábra).  $180^\circ$ -os fal esetében ez a szabad tágulás (pozitív magnetostrikciós akadályoztatva van, de csak a fal belsejében (3.7.b ábra).  $90^\circ$ -os doménfal esetében azonban az akadályoztatás kiterjed az egész doméntérfogatra (3.7.c ábra).

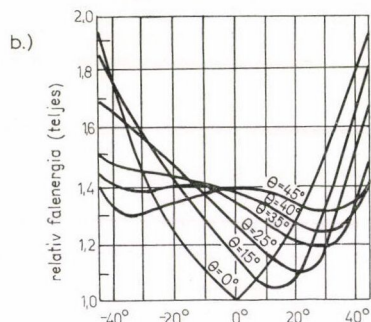
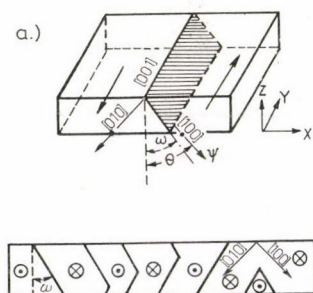
A doménfalak görbült felületek is lehetnek. A 3.8. ábra egy olyan helyzetet tüntet fel, amikor a görbültség nem jár pólusok képződésével a falfelületen.



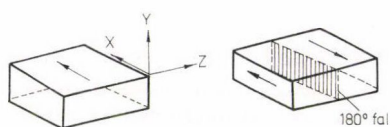
3.4. ábra



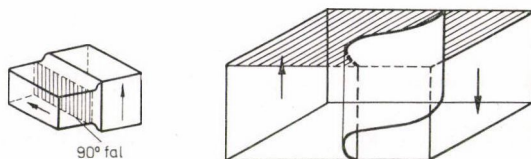
3.5. ábra



3.6. ábra



3.7. ábra



3.8. ábra

A falak pólusmentessége azonban nem természettörvény, nem áthághatatlan szabály, így néha az is előfordul, hogy az egyensúlyi szerkezetet az adott körülmények között olyan fal biztosítja, amelyre (3.13) kikötés nem teljesül. Ilyen esetre mutatott példát *Chikasumi* és *Suzuki* a belső feszültségekkel erősen terhelt Fe—Si transzformátor lemezekkel kapcsolatban [15].

A  $\gamma_B$  értékeiről Fe-3% Si-re vonatkozólag az I. táblázat ad tájékoztatást [13].

A teljes falenergia,  $E_B = \gamma_B \times \text{teljes falfelület}$ . Nagyságrendjének becslésére számítsuk ki a 3.2. ábrának megfelelő szerkezet teljes falenergiáját, ha  $D \sim d$ . Kiderül, hogy a falenergia az összes eddigi energiákhoz képest kicsi, mintegy  $50 \text{ ergcm}^{-3}$ .

### 3.2. Egyszerű doménszerkezet típusok vékony lemezanyagokon, külső mágneses tér nélkül

A várható szerkezetek meghatározásában az eljárás az, hogy a falakat megpróbáljuk úgy elrendezni az adott kristályban, hogy a hozzátartozó teljes energia minimális legyen. Nyilvánvaló, hogy még ez a közelítő eljárás is nagyon bonyolult olyan tetszőleges helyzetű és alakú kristályoknál, amelyekben még belső szerkezeti inhomogenitások is lehetnek. A tapasztalat szerint adott makroszkopikus **M** mágnesezettség és **H**<sub>0</sub> külső mágneses tér értékkel jellemzett állapothoz (a telítési állapotot kivéve) nem tartozik egyértelműen egy adott doménszerkezet. Ismételt át-mágnesezéskor nem kapjuk vissza ugyanazt a doménfal eloszlást. Ennek az az oka, hogy sok különböző szerkezethez tartozik közel ugyanakkora energia. Ennek ellenére a doménelméletnek sok doménszerkezet típust sikerült felderítenie a kísérleti tapasztalatokkal összhangban. Az egyszerű doménszerkezet típusokról kitűnő összefoglalást ad *Shilling* és *Houze* [16].

A továbbiakban is elsősorban Fe-3% Si vékony lemezanyagra gondolunk. Hubert számításai szerint a lemezvastagság sem közömbös. A lemezvastagságra megad egy olyan értéket, amelynél lényegesen vastagabb és lényegesen vékonyabb lemezekre az alább tárgyalattól eltérő szerkezetek várhatók. A kérdéses lemezvastagság Fe-3% Si esetében [16]:

$$d_0 = 20 \sqrt{A \cdot K} / (c_1 - c_2) = 0,25 \text{ mm.} \quad (3.19)$$

A közönséges transzformátorlemez is kb. ugyanilyen vastagságú. Az ilyen anyagon kialakuló doménszerkezetet célszerű felosztani alapstruktúrára és kiegészítő doménstruktúrára [16]. Az alapstruktúra állandóbb, kisebb változatosságot mutat, és az ezt alkotó fődoméneket lényegében csak a kristályméret és a külső feltételek határozzák meg. A kiegészítő struktúra azért alakul ki, hogy a fődomének fluxusait a határfelületeken rövidre zárja a magnetosztatikai energia csökkentése érdekében. A kiegészítő struktúrát lényegében helyi körülmények (felület orientációja, zárva-nyok stb.) határozzák meg.

I. TÁBLÁZAT

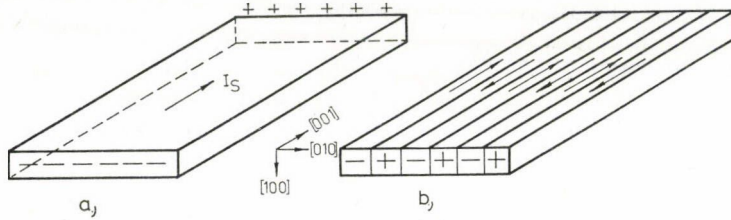
Fal típus	$\gamma_B$ (ergcm <sup>-2</sup> )		
	fal normális		
	[001]	[110]	[111]
90°	0,62	1,07	0,74
180°	1,24	1,72	—



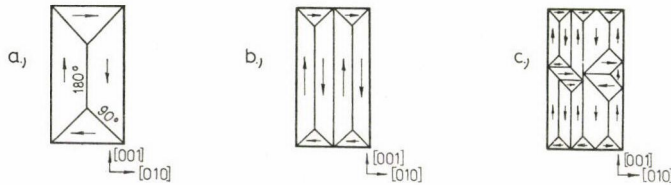
### 3.2.1. A felület (100) sík

A 3.9.a ábrán látható szerkezet 3.1.1. szakaszban megbecsült nagy magneto-  
statikus energiáját tetemesen lecsökkenthetjük a 3.9.b ábrának megfelelő domén-  
elrendezéssel. Itt azonban még mindig meglehetősen nagy magnetosztatikai energia  
lép fel a végeken levő pólusok miatt.

A 3.10.a, b, c ábrán látható szerkezeteknél viszont pólusok egyáltalán nem  
lépnek fel, tehát a magnetosztatikai energia zérus,  $E_s = 0$ .



3.9. ábra



3.10. ábra

Mindhárom esetben a test lemágnesezett állapotban van, azaz

$$\mathbf{VM} = \sum_i \mathbf{I}_i V_i = 0, \quad (3.20)$$

ahol  $\mathbf{M}$  a makroszkopikus mágnesezés,  $V_i$  az  $i$ -edik domén térfogata, és az összegezés kiterjed az összes doménra.

A három szerkezetnél a falenergiában és a rugalmas energiában van különbség. A 3.10.a szerkezetnél a kevés számú fal miatt a falenergia is jelentéktelen, azonban jelentős rugalmas energia lép fel amiatt, hogy a  $90^\circ$ -os falak megakadályozzák a domének szabad kitágulását. Minden domén ugyanis  $\lambda_{100}$  megnyúlást szenvedne az  $\mathbf{I}_i$  mágnesezés irányában. Meglehetősen nehéz pontosan kiszámolni ezt az energiát, mivel ehhez a kompatibilitási feltételeket is kielégítő inhomogén alakváltozásokat kellene meghatározni. Kittel [7] közelítésként feltételezte, hogy a  $[001]$  irányban álló,  $180^\circ$ -os fallal elválasztott „fődomének” szabadon tudnak tágulni, a hasáb végein elhelyezkedő fluxuszáró domének viszont a fődoménekkel együtt változnak úgy, hogy a minta alakja ugyanolyan legyen, mintha a záródomének nem is léteznének. Ebben az esetben a rugalmas extra energianövekedés Kittel szerint:

$$\Delta F^{\text{extra}} = (9/4)(c_1 - c_2)\lambda_{100}^2 v, \quad (3.21)$$

ahol  $v$  a záródomének térfogati hányada.

$\Delta F^{\text{extra}}$  értéke  $v=1$  esetén kb.  $10^3 \text{ ergcm}^{-3}$ , de amint a (3.21)-ből látható, a záródomének térfogati hányadának csökkentésével kisebbé tehető. Ez valósul meg a 3.10.b szerkezetnél. A doménfalenergia itt nagyobb ugyan, de az előző szakaszban mondottak szerint ez kis tételt jelent az energiamérlegben. Valóban a 3.10.b sokkal gyakrabban megfigyelt szerkezet, mint a 3.10.a.

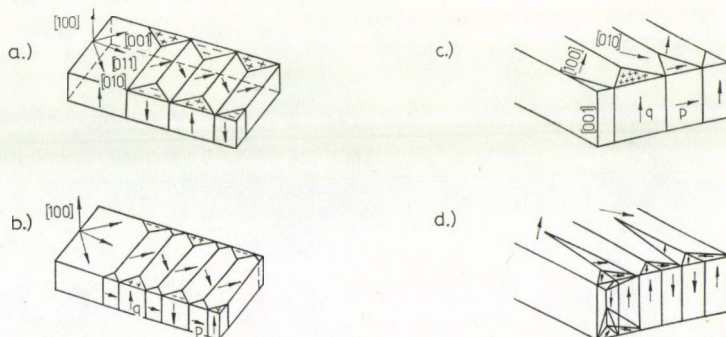
A 3.10.c ábra egy másik lehetséges szerkezetet mutat be. Ennél nemcsak a kristály határán, hanem belsejében is sok transzverzális, azaz a fődoménekre merőleges domén lép fel. Ilyen típusú szerkezet pl. akkor kedvező, ha belső maradó feszültségek vannak jelen és ezek olyan irányúak, hogy kedvezővé teszik a keresztirányú domének fellépését. (3.12) szerint a magnetoelasztikus energiaváltozás a feszültségnövekedéskor:

$$(df_r^a/d\sigma) = -(3/2)\lambda_{100} = -3500 \text{ ergcm}^{-3}/\text{kpm}^{-2}, \quad (3.22)$$

ha a domén mágnesezettsége párhuzamos a feszültséggel. Ez a doménszerkezetet erősen feszültségérzékenyvé teszi. Ha például a feszültség  $1 \text{ kpm}^{-2}$ , (aminél jóval nagyobbak is előfordulhatnak, mivel a Fe-3% Si folyáshatára  $\sigma_B = 37 \text{ kpm}^{-2}$ ), akkor a fellépő magnetoelasztikus energia  $3500 \text{ ergcm}^{-3}$ , ami több százszorosa a falenergia különbségnek 3.10.a, illetve b szerkezet között.

A kristály alakja sem közömbös a kialakuló szerkezet szempontjából. A 3.11.a, b ábrán látható doménszerkezet az ún. Néel-féle blokk. Fellépése olyankor várható, amikor a kristály oldaléle nem valamelyik könnyű mágnesezési iránnyal párhuzamos, hanem pl. az ábrán látható módon  $[011]$  irányú. Ekkor — Néel szerint — a 3.11.a, vagy b szerkezet kialakulása kedvező.

Hubert [18] felülvizsgálta Néel számításait és a 3.11.b szerkezetet úgy módosította, hogy ne lépjenek fel a felületen pólusok. Ezt látjuk a 3.11.d ábrán.



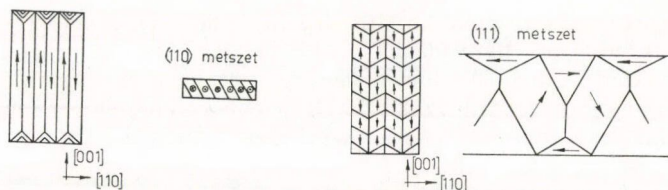
3.11. ábra

### 3.2.2. A felület $(110)$ sík

Ha a felület síkja az  $(110)$  kristálysíkkal esik egybe, akkor a felület csak egyetlen könnyű mágnesezési irányt tartalmaz. A legegyszerűbb lehetséges doménszerkezetet a 3.12. ábrán láthatjuk:

A záródomének konfigurációja igen bonyolult és kísérletileg nehezen megfigyelhető; erre vonatkozólag Hubert [10] közöl feltevéseket.



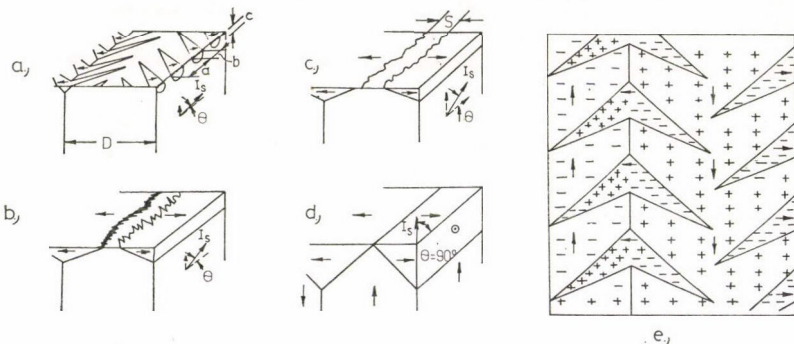


3.12. ábra

Ha a kristály lemágnesezése  $[110]$  irányban történt, akkor Dülgerov és Gyegtya-*rev* szerint a 3.12.b ábrának megfelelő szerkezet várható [19], amit találóan „parketta” szerkezetnek nevezhetnénk.

### 3.2.3. A felület nem tartalmaz könnyű mágnesezési irányt

Ha a felület az  $(100)$  kristálysíkkal kis, kb.  $0,5^\circ$ -os szöget zár be, akkor a felületen jellegzetes kiegészítő struktúra az ún. „karácsonyfa” ábra jelenik meg (3.13.a ábra). Ezt a szerkezetet Williams, Bozorth és Shockley [20] tanulmányozta részletesen. Megállapították, hogy ezek tulajdonképpen felületi képződmények, az ágak mélységbeli kiterjedése nem nagyobb vastagságuknál,  $c \sim b$ . Mint ahogy a 3.12.e ábrából megítélhető, a fődoménekre merőlegesen mágnesezett faágdomének csökkentik a magnetosztatikus energiát, hiszen kisebb lesz az átlagos távolság az ellentétes pólusok között. Az ágak a fődoménfalakból mint „törzsből” indulnak ki, és  $\pm 45^\circ$ -os szögben „lefelé” mutatnak, ha az  $(100)$  síkot vízszintesnek gondoljuk.

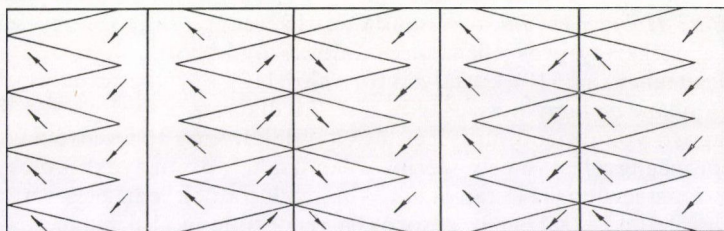


3.13. ábra

Az  $(100)$  síkhoz egyre nagyobb szöggel hajló felületeken a faágak egyre vastagabbak lesznek, majd még nagyobb inklinációknál ( $1,5$ – $2^\circ$ ) összenőnek egy cakkos szélű csíkká (3.13.b) ábra. Ez utóbbi tulajdonképpen már a 3.13.d ábrán látható fluxus záró doménszerkezet egy módosulatának is tekinthető.

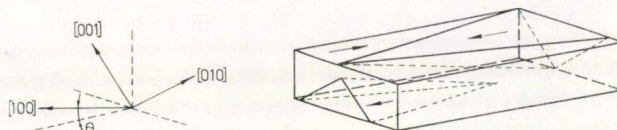
A karácsonyfa ábra egy másik változata látható a 3.14. ábrán. Ez akkor fordul elő, ha a fődomén falak  $90^\circ$ -osak.

Az  $(110)$  síkhoz közeli felületeken  $0,8^\circ$ -nál kisebb dőlési szögeknél még nem alakulnak ki fluxuszáró kiegészítő domének. Mivel azonban a falak az  $(110)$  síkhoz képest ferdén hajlanak az  $[100]$  tengely körül (3.1.4. szakasz, 3.6. ábra), azért egy

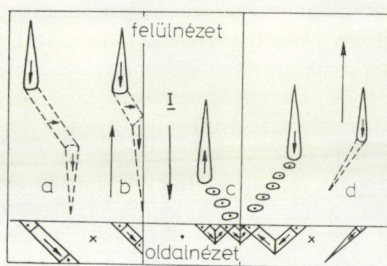


3.14. ábra

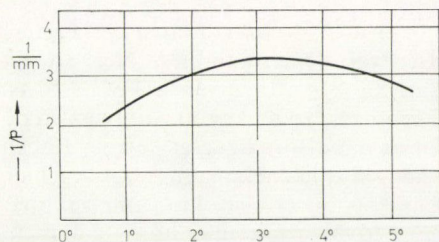
(110)-hoz képest kissé elfordult felületen a domén határvonalak nem pontosan párhuzamosak, és gyakran láthatók nyílhegy alakú képződmények is a kristályhatár környékén. A szerkezet modelljét a 3.15. ábra mutatja be Paxton és Nilan nyomán [21]. Ha a dőlésszög közel  $1^\circ$ , akkor a felületen lándzsahegy alakú mellékdomének jelennek meg. Mint ahogyan Sur és Dragosanszkij kimutatták [22], ezek nem egyszerűen felületi képződmények, mint a karácsonyfamintázatú domének, hanem rendszerint az alsó és a felső felületet, vagy a szomszédos domének azonos oldali felületeit kötik össze, az ottlevőkkel ellentétes pólusokat „szállítva” azokra. A szerkezet Sur és Dragonszkij által javasolt modellje a 3.16. ábrán látható. A lándzsahegy szer-



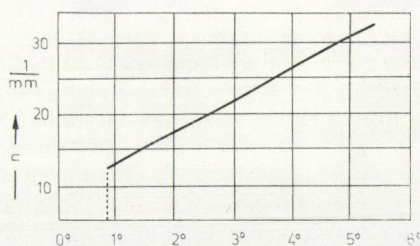
3.15. ábra



3.16. ábra



a.)



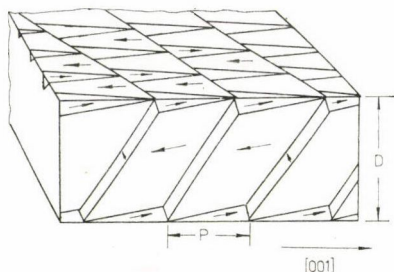
b.)

3.17. ábra

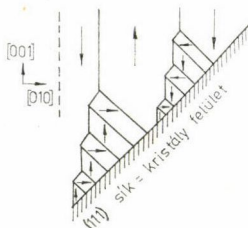


kezeteket *Bär*, *Hubert* és *Jillek* vizsgálta részletesen [23]. Összefüggéseket állapítottak meg a szerkezet egyes jellemzői és a dőlésszög között. (Dőlésszög alatt értjük a minta felületeknek a (110) kristálysíktól való [110] körüli elfordulását). A 3.17.a diagramon a  $p$  lándzsahegy hosszúságot, a 3.17.b diagramon pedig a lándzsaképződmények átlagos  $n$  vonalmenti sűrűségét látjuk a dőlési szög függvényében. A szerzők azt a régebbi megfigyelést, amely szerint a lándzsahegyek nagyobb dőlési szögeknél ( $\Theta \sim 3,5^\circ$ ) fésűfogszerűen [111] irányú sorokba rendeződnek lemágnesezett állapotban is [21], kiegészítették azzal, hogy a sorokba rendeződés külső mágneses tér hatása alatt kisebb dőlési szögeknél is bekövetkezik, és sokkal kifejezettebbé válik. A szerzők által javasolt modell a rendezett lándzsa doménszerkezetre a 3.18. ábrán látható.

Olyan felületeknél, amelyekhez minden könnyű mágnesezési irány nagy szögben hajlik, *Martin* [24] javasolt modellt. A Martin-féle lépcsős szerkezetet a 3.19. ábrán mutatjuk be.



3.18. ábra



3.19. ábra

Az ábrán nem a felület síkját látjuk felülről, hanem egy képzeletbeli metszetet az (100) síkkal párhuzamosan. *Martin* szerint a felület felé tartó fődomének osztódása több lépcsőben történik. A  $180^\circ$ -os fődomének mérete kb. 1 mm a fődoménekhez  $90^\circ$ -os falakkal csatlakozó mellékdomének átlagosan tíz részre osztják a fődóment, majd ezek ismét továbbosztoznak úgy, hogy a felületen megfigyelt átlagos doménszélesség kb.  $3 \times 10^{-4}$  cm lesz.

A Martin-féle modellben a kristályfelület természetesen nem pólusmentes, de az átlagos pólustávolság és ennek megfelelően a szórt térenergia is kicsi a finom osztódás következtében.

### 3.3. A külső mágneses tér hatása

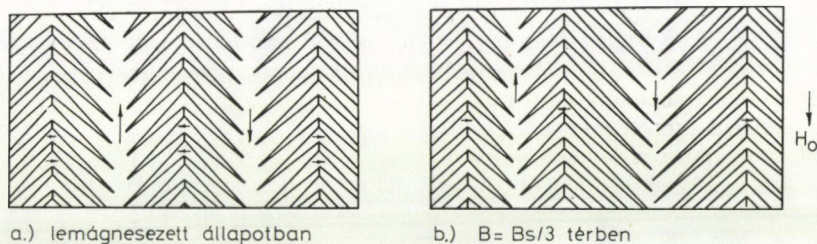
A külső mágneses tér várható hatását a Fe-3% Si ötvözet doménszerkezetére a *Néel* [25] által megfogalmazott alapelv segítségével elemezhetjük. A Néel-elv azt mondja ki, hogy a nagy köbös anizotrópiájú anyagokban (amilyen a Fe-3% Si is) a domének úgy oszlanak meg a hat könnyű mágnesezési irány között, hogy az eredő  $\mathbf{M}$  makroszkópos mágnesezés mindig párhuzamos a külső mágneses térrel. Ebben az összefüggésben a makroszkópos azt jelenti, hogy a domének mágnesezettségének a doméntérfogatokkal súlyozott átlagát kell venni olyan térfogatokra, amelyek már elég sok domént tartalmaznak. A Néel-elv más szóval azt jelenti, hogy a doménszerkezet úgy változik meg a külső tér hatására, hogy csak a tér irányába eső mágnesezettség lesz zérustól különböző, arra merőlegesen viszont az eredő mágnesezés-



nek zérusnak kell maradnia. Tehát miközben növekednek azok a domének, amelyeknek a mágnesezettségei hozzá tudnak járulni a külső tér irányába eső eredő mágnesezettség növekedéséhez, a közömbös irányú domének csak annyiban változnak meg, hogy ne bomoljon meg a térre merőleges irányokban a magnetosztikai egyensúly. Ha pedig az eredeti doménszerkezetben nem voltak olyan irányú domének, amelyek hozzájárulhattak volna a térrel párhuzamos eredő mágnesezettség növekedéséhez, akkor megindul a megfelelő irányítású újabb domének nukleálódása. A 3.1.1. szakaszban említettük, hogy a doménszerkezet alakulásában a legfőbb tényező mindig a magnetosztatikus energia. Ha most — első közelítésben — emellett elhanyagoljuk a többi tényezőt, akkor durván azt mondhatjuk, hogy külső mágneses tér hatására a doménszerkezet átrendeződése (nem túlságosan nagy terek esetében) addig tart, amíg a mágneses pólusoktól származó lemágnesező tér éppen kiegyenlíti a külső teret az anyag belsejében.

A doménszerkezetek kísérleti vizsgálata megerősíti a Néel-féle alapelvet és a belőle levont következtetéseket. (100) felületű Fe—Si egykristálylemezen végzett vizsgálatokat *Träuble* [26], amely szerint viszonylag gyenge mágneses tér hatására a tér irányához képest kedvező irányítású domének növekednek a többiek rovására és a doméntérfogatnövekedés a doménfalak önmagukkal párhuzamos eltolódásával történik. A szerző megfigyelte, hogy a megfelelő irányítású új domének nukleálódása főleg a kristály peremén levő kiegészítő struktúrában történik.

A karácsonyfa doménszerkezet mágnesezéskor bekövetkező változását mutatja be a 3.20. ábra, amelyet *Williams, Bozorth* és *Schockley* figyelt meg [20].



a.) lemágnesezett állapotban

b.)  $B = B_s/3$  térben

3.20. ábra

Az (110) felületű kristályok mágnesezésekor is a falak önmagukkal párhuzamos eltolódása megy végbe, ha a külső tér [001] irányú. Ha azonban a tér [110] irányú, azaz a fődoménekre merőleges, akkor Hubert vizsgálatai szerint a 3.12.b ábrákhoz hasonló szerkezet alakul ki, amely, az eredeti szerkezettel ellentétben, képes fluxust szállítani a tér irányába is [10].

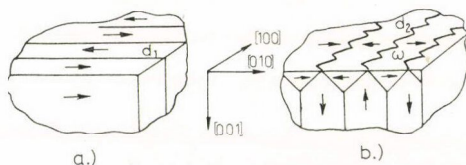
A nem pontosan (110) felületeken megjelenő kiegészítő doménszerkezetek változásáról általánosságban annyit lehet mondani, hogy azok igyekeznek helyreállítani a fődomének eltolódásai miatt megbomlott magnetosztatikai egyensúlyt, azaz biztosítják például  $x$  irányú mágneses tér esetén azt, hogy  $M_x$  és  $M_y$  közel zérus maradjon. Ezt (110)-hoz közeli felületekre vonatkozólag Passon mérései igazolják [27]. A kiegészítő doménszerkezet emiatt gyakran még igen nagy térerősségeknél is, a telítés közelében is megmarad, különösen akkor, ha a kristályfelület nagyobb szögekkel hajlik a könnyű irányokhoz [26].



### 3.4. Külső rugalmas feszültségek hatása

A közel (100) felületű kristály doménszerkezetét vizsgálta Williams, Bozorth és Shockley [20] külső rugalmas feszítés és összenyomás hatására. A külső feszültség a [001] irányú fődoménfalakkal volt párhuzamos. Növekvő húzófeszültségnél csökkent, majd teljesen eltűnt a húzófeszültségre merőlegesen mágnesezett faág domének által elfoglalt felület. Összenyomás hatására viszont először nőtt a keresztirányú domének száma, bonyolult kiegészítő doménszerkezetet alakítva ki, ezután pedig eltűntek a [001] irányú  $180^\circ$ -os eredeti fődoménfalak is és erre merőlegesen új  $180^\circ$ -os falak képződtek. A nyomófeszültség további növelésekor a  $90^\circ$ -os falak teljesen eltűntek.

A mechanikai feszültségeknek ezt a hatását könnyen megérthetjük a magnetoelasztikus hatás figyelembevételével. A transzverzális, azaz a fődoménekre merőlegesen mágnesezett domének magnetoelasztikus energiája nő, ha a húzófeszültség merőlegesen vagy a nyomófeszültség párhuzamosan áll velük ((3.12) egyenlet). Ezért ilyen feszültségeket alkalmazva a transzverzális domének jelenléte kedvezőtlen, tehát számuk csökken. A feszültség irányának megfordítása ellentétes értelmű változást hoz, sőt új, kedvező irányú domének nukleálódása is végbemegy.



3.21. ábra

Corner és Mason (100) felületű kristály doménszerkezetváltozását vizsgálta [011] irányú nyomófeszültség hatására [28].

A 3.21.a ábra a feszültségmentes állapotot mutatja. A 3.21.b rajz pedig a feszültséggel terhelt anyag felületén megfigyelhető cikcakk domének elrendezését ábrázolja. A modell eredetileg Chikasumitól származik, aki első ízben értelmezte ezt

a szerkezetet a mechanikusan polírozott mintákon [15]. Chikasumi feltételezett egy, a felületre merőleges húzófeszültséget, ami a doméneket eredeti irányukból átfordítja a felületre merőleges irányba.

Corner és Mason rámutatott, hogy a felületre merőleges irányt tulajdonképpen a másik két könnyű mágnesezési irányban alkalmazott nyomófeszültségek teszik kedvezővé [28]. Chikasumi azt is kimutatta, hogy éppen ez a cikcakkosan futó doménfal, amely pólusokat is tartalmaz doménről-doménra váltakozó előjellel, adja a legkisebb energiájú szerkezetet, sőt összefüggést állapított meg a 3.21.b ábrán jelölt  $\omega$  szög és a feszültség, illetve  $d_2$  domén szélesség és a feszültség között.

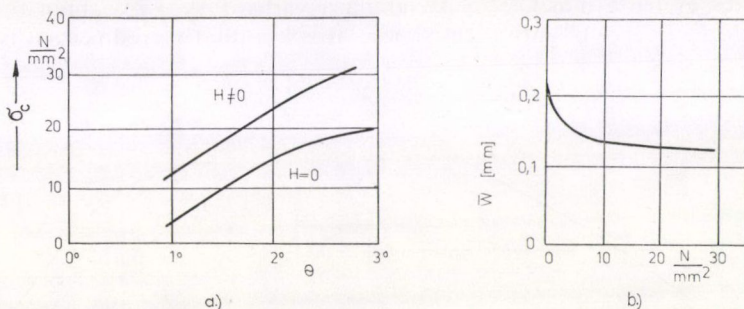
Corner és Mason [29] más vizsgálatai azt mutatták, hogy egzaktul (110) felületeken a [001] irányú húzásnak csak jelentéktelen hatása van a doménábrára, ellenben, ha a felület  $3^\circ$ -kal hajlik az (110) síkhoz, akkor húzás hatására a kiegészítő lándzsadomének fokozatosan kisebbek lesznek növekvő feszültségnél, majd kb.  $20 \text{ kpm}^{-2}$  értéknél teljesen eltűnnek, és csak a  $180^\circ$ -os falakkal elválasztott fődomének maradnak meg.

Bär, Hubert és Jillek [23] vizsgálta a lándzsadoméneket eltüntető  $\sigma_c$  kritikus húzófeszültségnek a  $\theta$  dőlésszögtől való függését közel (110) felületeken. A 3.22.a ábrán láthatjuk ezt az összefüggést. A szerzők azt is megállapították, hogy a húzófeszültség növekedésével a fődomének átlagos  $W$  szélessége is csökken. Ezt mutatja a 3.22.b diagram. Megjegyezzük, hogy az összefüggést polikristályos (Goss-textúrá) anyagon vizsgálták és a  $W$  domén szélesség nagyszámú különböző orientációra vég-

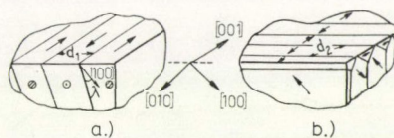


zett átlagolás eredménye. A doménszélesség csökkenést azzal indokolhatjuk, hogy mivel eltűntek a húzás következtében kedvezőtlené vált mellékdomeének, a megnövekedett pólussűrűséget a domeének finomodása igyekszik kompenzálni.

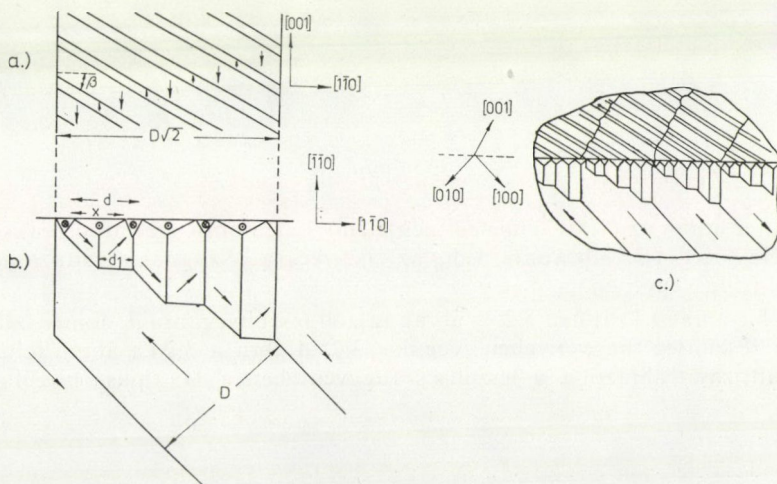
$[1\bar{1}0]$  irányú húzófeszültségeknél két különböző feszültségábra figyelhető meg *Corner* és *Mason* szerint [29]. Kis feszültségeknél  $1\text{--}20\text{ kpmm}^{-2}$  között az I típusú szerkezet van túlnyomórészt jelen. Ezt látjuk a 3.23.b ábrán a feszültségmentes (a) szerkezettel együtt. Mivel az  $[1\bar{1}0]$  irányú húzófeszültség kedvezőtlené teszi az eredeti  $[001]$  irányú földomeének, ezért ezek csak viszonylag kis térfogati hányaddal, záródomeének formájában vannak jelen. Nagyobb feszültségeknél,  $20\text{--}30\text{ kpmm}^{-2}$ -nél még tovább csökken a záródomeének térfogati hányada a 3.24. ábrán látható,



3.22. ábra



3.23. ábra



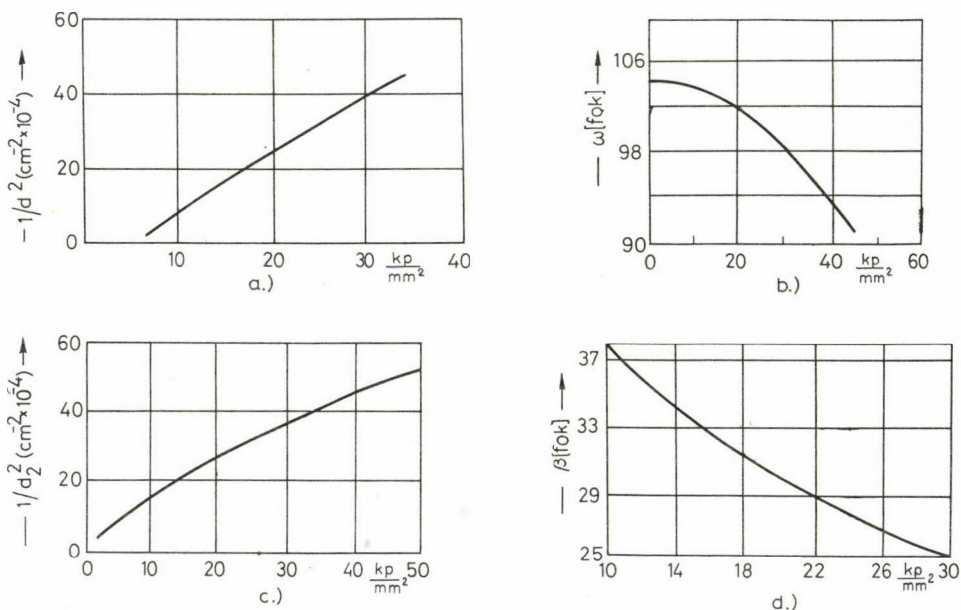
3.24. ábra



II. típusú feszültségábra megjelenésével. Ez a feszültségábra nagyon hasonlít a Martin-féle lépcsős szerkezethez (3.19. ábra). Közös vonásaik abból erednek, hogy tulajdonképpen egyik esetben sincs a felületen könnyű mágnesezési irány.

[001] irányú nyomófeszültségek alkalmazása pontosan ugyanolyan feszültség-ábrákat eredményez az (110) felületen, mint a  $[1\bar{1}0]$  irányú húzófeszültség. Nyilvánvaló azonban, hogy — geometriai okokból — a II. feszültségábra [001] irányú terhelés esetében kisebb feszültségeknél jelenik meg mint  $[110]$  irányú feszítésnél.

Megjegyzendő, hogy széles feszültségintervallumban az I. és II. feszültségábra együtt látható. Hubert [10] rámutatott arra, hogy a kialakuló feszültségábrák a lemágnesezés módjától is függenek; adott irányú lemágnesezéskor az egyik, más irányú lemágnesezés esetén a másik ábra kialakulása várható. A 3.25. ábrán bemutatjuk Corner és Mason feszültségábrákkal kapcsolatos kvantitatív eredményeit is.



3.25. ábra

A 3.25.a ábrán az (100) felületen megjelenő 3.21.b ábra szerinti cikcakk domének  $d_2$  szélességét, a 3.23.b ábrán pedig az  $\omega$  „cikcakk” szögnek a változását látjuk a feszültség függvényében.

A 3.25.c ábra az I. típusú 3.23.b ábrán rajzolt feszültségábra  $d_2$  doménszélességét mutatja a feszültség függvényében. Végül a 3.25.d ábra a 3.24.a ábrán feltüntetett  $\beta$  szög változását ábrázolja a feszültség függvényében a II. típusú feszültségábra esetén.

### 3.5. Belső feszültségek hatása

A belső feszültségek hatása a doménszerkezetre lényegesen függ attól, hogy milyen a feszültség változása a doménméretekhez képest. Ha a feszültségváltozás makroszkópos jellegű, azaz doménméretekben közel állandó a feszültség, akkor a doménszerkezetre való hatásának tárgyalása hasonló a külső feszültségéhez. Ilyen jellegű belső feszültségek jelennek meg az anyagban például az inhomogén képlékeny alakítás következtében. A diszlokáció szerkezet ilyen esetben nagyszámú, azonos Burgers vektorú diszlokáció csoportosulásokból áll.

Homogén képlékeny alakításkor jórészt csak rövid hatótávolságú belső feszültségek alakulnak ki. Ezek hatását vizsgálva *Träuble* (100) felületű, törésig deformált kristályokon megfigyelte, hogy a  $90^\circ$ -os falak részvétele a mágnesezési folyamatokban nagymértékben lecsökkent [26]. A lemágnesezett anyag doménstruktúrája is megváltozott az alakítatlanhoz képest: a  $180^\circ$ -os falakkal elválasztott fődomének [010] helyett [001] irányúvá lettek, közel merőlegesek a csúszásvonalakra.

### 3.6. A megengedett doménszerkezetek szabályai Fe-3% Si-ben

A kísérletileg tapasztalattal egyező doménszerkezetek szerkesztési és értelmezési szabályait, amelyeket e fejezetben is alkalmaztunk, *Hubert* [10] az alábbiakban foglalta össze:

1. Az összes domén mágnesezési vektorának könnyű mágnesezési irányban kell állnia. (Néhány fokos eltérés lehetséges.)
  2. A szerkezetnek szórt-tér mentesnek kell lennie. (Itt is megengedhető azonban a telítési értéknek megfelelő felületi töltéssűrűség néhány százaléka.)
- Az 1. és 2. szabálynak eleget tevő doménszerkezetet „megengedett”-nek nevezzük.
3. A domének eredő mágnesezettsége párhuzamos kell, hogy legyen a külső térrel, úgy, hogy nem túl nagy térerősségeknél a térerősség az anyag belsejében zérus legyen.
  4. Egy nem túl erős külső rugalmas feszültségtérben az a könnyű mágnesezési irány részesül előnyben, amelyre a magnetoelasztikus energia a legkisebb.
  5. A doménszerkezetnek lehetőleg mentesnek kell lennie a magnetosztatív eredetű belső feszültségektől. Ennek megfelelően a  $180^\circ$ -os falak a legkedvezőbbek. Ha  $90^\circ$ -os falak szükségesek, akkor a pólusmentes [110] normálisú fal kedvező. A záródomének össztérfogatának lehetőleg minél kisebbnek kell lennie.
  6. Olyan felületeken, amely nem tartalmaz könnyű mágnesezési irányt, kiegészítő doménszerkezet alakul ki oly módon, hogy a felület makroszkopikus léptékben nézve szórt-tér mentes legyen. A kiegészítő doménszerkezet annál finomabban osztott, minél nagyobb szögben hajlanak a könnyű irányok a felülethez.

### 4. A doménszerkezet megfigyelésének módszerei

A doménszerkezetek megfigyelésének különböző módszereit két csoportba sorolhatjuk. Az első csoport a doménhatárok és a mágnesezés eloszlás egyéb részleteinek láthatóvá tételére a felületközeli szórt teret használja ki. Ilyen a Bitter-technikai [30], az elektronsugár eltérítés [31] és a rezgő permalloyszondás módszer [32].

A második csoportbeli módszereknél közvetlenül a ferromágneses anyaggal történő olyan kölcsönhatásokat vesznek igénybe, amelyek érzékenyek a mágnesezés



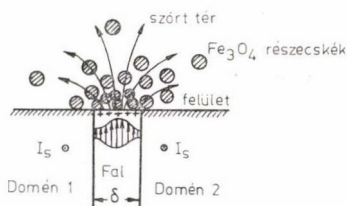
irányára. Ezeknél a módszereknél nem a doménhatárokat, hanem magukat a doméneket látjuk. Az ebbe a csoportba tartozó legfontosabb módszerek a Kerr-, illetve a Faraday-effektuson alapuló technika [33], a Lorentz-mikroszkópia [34], és a Bormann-féle röntgensugár eltérítési módszer [35].

A következőkben csak a Bitter- és a Kerr-technikával foglalkozunk.

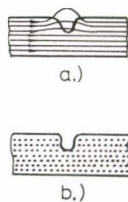
#### 4.1. Bitter-technika

Ha a megfelelően előkészített minta felületét finom eloszlású mágneses részecskékből álló szuszpenzióval vonjuk be vékonyan, akkor a felületi szórt mágneses tér gradiense a mágneses tér maximumhelyeire igyekszik vinni a részecskéket. Ha a részecskék a közegben szabadon mozoghatnak, akkor ezzel a tendenciával szemben csupán a Brown mozgás hat. A Bitter-kép képződés feltételeit elméletileg *Kittel* [7] és *Bergmann* [36] vizsgálták. Gondolatmenetüket igen leegyszerűsítve azt mondhatjuk, hogy ha  $\Delta H$  a mágneses térerősség különbség a háttér és egy kitüntetett hely között, és  $p$  egy részecske mágneses momentuma, akkor  $p \cdot \Delta H > 3kT$  a feltétele a háttértől elkülönülő részecskekonzentráció létrejöttének. Ezek a kitüntetett helyek leggyakrabban a doménfalaknak a felülettel való találkozási helyei (4.1. ábra). A ferromágneses részecskék tehát elsősorban a falaknak a felülettel való metszésvonalát teszik láthatóvá. A *Williams*, *Bozorth* és *Shockley* által először alkalmazott karcolási technikával a mágnesezettségi vektor egyenesét is meghatározhatjuk a doménhatárok közötti területeken. Ha a felületre különböző irányokban finom karcsnyomokat viszünk, akkor azok a karcsnyomok, amelyek közel merőlegesek a mágnesezettségre, kidekorálódnak, a más irányúak viszont láthatatlanok maradnak a Bitter ábrán. A jelenség magyarázata a 4.2. ábráról leolvasható. A karcolásokra gyakran nincs is szükség, mert olyan kolloidszemcsesorok képződnek a domének belsejében, amelyek a tapasztalat szerint mindig merőlegesek a mágnesezettség irányára.

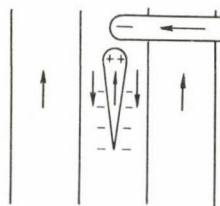
A mágnesezési vektor irányát is megadhatjuk egy nagyon vékony mágnesű segítségével a 4.3. ábrán vázolt módon. A nyílhegy alakú kompenzáló domén a mágnesezettség irányát mutatja, ha a mágnesű déli pólusát közelítjük a felülethez.



4.1. ábra



4.2. ábra



4.3. ábra

Sok információt szerezhetünk a felületi pólusok előjeléről segédterek alkalmazásával, amelyek még nem változtatják meg lényegesen a doménszerkezetet, de erősítik vagy gyengítik a szórt mágneses tereket.

Sokáig azt gondolták, hogy a Bitter-féle sávok kizárólag a doménfalakhoz kötődnek, és valóban meg is jelennek valahányszor a doménfal a felülettel találkozik.



Kiderült azonban, hogy ez nem mindig van így. *Goodenough* [11] szerint pl. ha a fal túlságosan ferdén metszi a felületet, azaz a fal síkja kicsi szöget zár be a felület síkjával, akkor a felületi pólussűrűség túlságosan kicsi lesz a porábrákhoz szükséges mágneses tér keltéséhez.

A következő szakaszban ismertetendő Kerr-módszer és a Bitter-módszer egyidejű alkalmazásával *Kranz*, *Hubert* és *Müller* [37] egy sor olyan esetet mutattak be, amikor a doménfalak elhelyezkedése és a Bitter-sávok megjelenése közötti kapcsolat nem olyan egyszerű, mint korábban hitték. Egy extrém példa erre a nagy belső feszültségeket tartalmazó anyagoknál megjelenő Bitter-ábra, amelyeknél a Bitter vonal nem a doménfalaknál, hanem a domének közepén húzódik. *Dülgerov* és *Gyegtyarev* [19] pedig azt mutatta ki, hogy a 4.4.a ábrán látható ún. V-vonal a Bitter-ábrán alig, vagy egyáltalán nem látszik. Egy lehetséges módja a felületi töltés kompenzálódásának a 4.4.b ábrán látható [37].



4.4. ábra

Bitter, aki először tanulmányozta a mágneses szerkezeteket ezzel a módszerrel finomra őrölt gamma vasoxidot használt, amelyet a részecskék mozgékonyságának növelésére etilacetátban szuszpendátatott. A szuszpenzió optikai feloldóképessége azonban nem volt kielégítő. Az *Elmore* [38] által készített doménszerkezet vizsgáló folyadék azonban már valódi kolloid volt.

A gamma ferrit részecskéket kémiai úton állították elő kolloid finomságban, majd kolloidvédővel stabilizálták. A jó Bitter-ábrák készítéséhez a részecskéknek nem szabad túl kicsiknek lenniük, a részecskeméretnek a kolloidméret felső határán kell lenniük. A kolloidmódszer feloldóképessége max.  $5 \times 10^{-5}$  cm. A különböző célú vizsgálatok számára a kolloid módszer számos változatát dolgozták ki. A feloldóképesség növelése vált lehetségessé, pl. az ún. száraz Bitter-eljárással, ahol a kolloidvédő nem vizes oldat, hanem száradó lakk, és a lakklevonat elektronmikroszkóppal vizsgálható.

#### 4.2. Kerr-technika

A Kerr-féle magnetooptikai eljárásnak az az alapja, hogy a ferromágneses fémről való fényvisszaverődéskor fellép egy, a mágnesezés irányától függő ún. Kerr-komponens is a visszavert nyalámban.

A Kerr-komponens amplitúdója kb. ezredrésze a közönséges visszavert amplitúdónak, ezért csak úgy tudunk kontrasztot létrehozni a különböző mágnesezett-ségű helyekről visszavert sugarakban, ha normális visszaverődést annyira lecsökkentjük, hogy azonos nagyságrendben legyen a Kerr-amplitúdóval. Erre az ad lehetőséget, hogy a Kerr-amplitúdó a normálisan visszaverődőthöz képest merőlegesen polárizott. Polarizációs eszközökkel tehát lecsökkenthetjük a közönséges amplitúdót a Kerr-amplitúdó lényeges csökkentése nélkül. A Kerr-technika nagyon



jó minőségű optikai eszközöket és kiváló felületelőkészítést kíván. A kontraszt javítására reflexióképességet csökkentő diektromos interferenciaretegeket párologtatnak a fémfelületre.

Összehasonlítva a Kerr-módszert a Bitter-eljárással azt látjuk, hogy a két módszer jól kiegészíti egymást. Mindkettő a felületi doménszerkezetre nyújt felvilágosítást, de míg a Bitter-módszer a szórt mágneses tér eloszlásáról ad információt, addig a Kerr-módszer a mágnesezési vektorok eloszlásáról. Ennélfogva pl. amíg a Kerr-módszerrel láthatók olyan domének is, amelyeket a Bitter-eljárás nem tud kimutatni a szórt-tér kompenzálódása miatt, addig ez utóbbi a felület alatt elhelyezkedő mágneses pólusok hatását is érzékeli [39]. Vannak azonban olyan esetek is, amiben a Bitter-módszer egyértelműen alkalmatlan, mint pl. nagy hőmérsékleten, és dinamikus vizsgálatoknál, ahol viszont a Kerr-módszer még jól használható [40].

### 5. Saját vizsgálatok vas-szilícium transzformátor- és dinamólemezek doménszerkezetére és mágneses tulajdonságaira vonatkozóan

#### 5.1. A kísérleti technika leírása

A kísérleti munka során vas-szilícium lemezanyagokon kialakuló doménszerkezeteket vizsgáltunk, valamint a mágneses tulajdonságok megállapításához hiszterézis görbéket vettünk fel.

A doménszerkezet-vizsgálathoz Fe-4,1% Si összetételű, 0,25 mm vastagságú kockatextúrás, Fe-3,8% Si összetételű, 0,35 mm vastagságú Goss-textúrás transzformátorszalagokat, és Fe-3,1% Si összetételű, melegen hengerelt, textúrátlan dinamólemezeket használtunk fel. A kocka- és Goss-textúrás lemezek krisztallitjainál az előnyben részesített felületi síkok {100}, illetve {110} és a szemcsék <001> irányai a hengerlés irányához esnek közel. A melegen hengerelt dinamólemezeknél az egyes szemcsék felületi síkjai és kristálytengelyei számára nincsenek kitüntetett helyzetek.

A doménszerkezet-vizsgálathoz felhasználtunk ezenkívül olvadékból lebegtetőzónázással húzott kb. 4% Si tartalmú, pontosan nem ismert összetételű vas-szilícium anyagot is.

A hiszterézis görbéket melegen hengerelt dinamólemezeken vettük fel.

A felületi doménszerkezet láthatóvá tételére a Bitter-eljárást alkalmaztuk. A megfelelő szemcsefinomságú, stabil kolloid előállítását *Elmore* [38] receptje alapján végeztük, azzal a módosítással, hogy az előállított kolloidot ultracentrifugálással tovább finomítottuk.

A kolloid készítéséhez először egy durva precipitátumot készítettünk *Lefort* módszerével [41]. Feloldottuk 2 g  $\text{FeCl}_2 \cdot 4 \text{H}_2\text{O}$ -t és 5,4 g  $\text{FeCl}_3 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$ -t 300 cm<sup>3</sup> meleg vízben, és folytonos keverés közben, csepegtetve hozzáadtunk 50 cm<sup>3</sup> vízben feloldott 5 g NaOH-t. A képződött barnásfekete csapadékokat megszártuk, hogy eltávolítsuk a sókat és a fölös NaOH-t, majd szűrőpapíron még többször átöblítettük desztillált vízzel, végül HCl 0,01 N oldatával. Ez utóbbi lépés a peptizálás, azaz a precipitátum fellazítása, a kolloidkészítés legkényesebb művelete, mivel a peptizálás időpontja (azaz a csapadék készítésétől a peptizálás kezdetéig eltelt idő) és időtartama döntően hat a szemcsefinomságra. Az így előkezelt precipitátumot áttettük 0,5%-os szappanoldatba és rövid ideig forraltuk; ennek során alakul ki a kolloid-védő bevonat a  $\gamma$  ferrit szemcsék körül.



Ez a kolloid még eléggé durva szemcséket is tartalmazott, ami ugyan előnyös a képkontraszt szempontjából, azonban a finomabb doménszerkezeteknél, mint pl. az ún. „labirint ábra” nem biztosít kellő feloldást.

A Bitter-ábrák láthatóvá tételéhez jól polírozott, tükörfényes felületeket kell létrehozni. Erre általában kétféle út kínálkozik: mechanikai és elektrokémiai polírozás. A mechanikus polírozás igen szép felületet ad, amely tükörfényes és mentes a hullámosságtól is, azonban a mechanikai beavatkozás a felület közelében teljesen megváltoztatja a doménszerkezetet. Ezért utána vákuumban kell hőkezelní a mintát. Elektrolitikus vagy kémiai polírozáskor viszont — bár tükörfényes a felület — gyakran nem kielégítően sík, hullámos, a zárványok közelében gödrös és a szélek le-gömbölyödnek.

Vizsgálatainkhoz legtöbbször elektrolitos polírozást alkalmaztunk közvetlenül a 400-as finomságú csiszolópapír után. Polírozó folyadékként leginkább bevált a 9sr.  $H_3PO_4$ , 1sr.  $Cr_2O_3$  keverék, amelynek fő előnye az, hogy széles polírozó áramsűrűség tartományban ( $8-15 \text{ Acm}^{-2}$ ) ad fényes felületet, és a felületet árammentes állapotban csak gyengén oxidálja, így a polírozó áram lekapcsolása és a minta lemosása között eltelt idő alatt a minta felülete nem korrodálódik észrevehetően.

A kísérletek során mechanikai polírozást is alkalmaztunk olyan esetekben, amikor lényeges volt a sík felület és a viszonylag éles sarok a minta szélén. Ilyenkor a mechanikus polírozást kombináltuk rövid idejű elektropolírozással, amely utóbbi eltávolította a képlékenyen deformált legfelső réteget. Az elektropolírozást követően alapos lemosást végeztünk vízsugárral, desztillált vizes öblítéssel, majd magával a kolloid oldattal is azért, hogy a polírozó oldat utolsó nyomait is eltüntessük a mintáról. Ezután még néhány csepp kolloidot cseppentve a felületre és mikroszkóp fedőlemezletakarva „Epityp”, illetve „Neophot” típusú mikroszkópon vizsgáltuk a Bitter-ábrákat. A speciális, tárgyasztalon elhelyezhető, kis koercitív erejű vasmagos tekercssel a mintát mágneses térbe is lehetett helyezni.

A külső mechanikai feszültség doménszerkezetre gyakorolt hatásának bemutatásához a rugalmas feszültséget a minta meghajlításával hoztuk létre. Előzetes kísérletek ugyanígy azt mutatták, hogy ugyanazok a hatások érhetők el hajlítással, mint direkt terheléssel. A hajlítási módszert azért tartottuk előnyösebbnek, mert technikai megvalósítása a mikroszkóp tárgyasztalán — különösen nyomófeszültségek esetében — sokkal egyszerűbb a direkt módszernél, ezenkívül a hajlítás valószínűleg kevesebb, a minta befogásából eredő, parazita feszültséget ébreszt a mintában. A hajlítást mikrométer csavar segítségével végeztük. A feszültség irányának megfordítása egyszerűen a hajlítás irányának megcserélésével történt. A behajlás pontos mérésével a feszültség nagysága is megállapítható. A módszer hátránya az, hogy a feszültségeloszlás hajlításnál inhomogén a keresztmetszetben, és ez kvantitatív doménvizsgálatoknál már zavaró lenne. Ez utóbbi azonban nem volt jelenlegi vizsgálataink célja.

## 5.2. Megfigyelt Bitter-ábrák

### 5.2.1. Lágy állapotú kockatextúrás mágnesszalagok lemágnesezett állapotban

Az 5.1 képen jellegzetes Bitter-ábrát láthatunk kockatextúrás anyag pontosan (100) felületű szemcséjén kialakuló doménekről. A doménhatárok egyenesek, határozott vonalúak. A domének „belsejében” — azaz a felületnek azon tartományában, ahol a mágnesezettség egyirányú — a mágnesezettség irányát a kialakuló kolloid



szemcsesorok irányából meg tudjuk határozni. A 4.1. részben említettek szerint ugyanis a mágnesezettség mindig merőleges a szemcsesorok irányára. Ha a mágnesezettségi vektor értelmét egy esetben önkényesen megválasztjuk, akkor figyelembe véve azt, hogy a mágnesezettség normális komponensének folytonosan kell átmenni a doménhatárokon (különben „szabad” pólussűrűség és ezzel többlet magneto-sztatikai energia lépne fel), megszerkeszthetjük a mágnesezettség elrendeződését a teljes felületen. Az 5.1. képen látható elrendezés a 3.2.1. szakaszban említett, 3.10.c sematikus ábrának megfelelő elméleti struktúrához hasonlít. Fellépnek benne  $90^\circ$ -os és  $180^\circ$ -os falak egyaránt.



5.1. ábra



5.2. ábra

Az (100) felületeken kialakuló doménábrákon általában pontos  $45^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $135^\circ$  szögű hajlásokat mérhetünk a doménhatárok találkozásánál.

Ha a felület síkja eltér az (100) síktól úgy, hogy a könnyű mágnesezési irányok néhány fokok szöget zárnak be a felület síkjával, akkor az így kialakuló szerkezetekre már nem jellemző a pontos  $45^\circ$  és  $90^\circ$ -os szög. Ilyen látható az 5.2. ábrán. Ez a fotó a  $90^\circ$ -os doménhatárok mentén kialakult karácsonyfa ábrát mutatja, amelyet a 3.2.3. szakaszban írtunk le. (3.14. ábra).

Szemcseorientáció meghatározására nem volt lehetőségünk, de más vizsgálatok eredményeivel való összehasonlítás alapján  $1-2^\circ$  pontossággal sok esetben behatárolhatjuk az orientációt jellemző szögeket [42], [43]. Az eredmények olyan lágy lemezanyagok esetében, amelyeknek vastagsága is közel megegyezik, igen jól reprodukálódhatnak, ezért a felületi doménszerkezet vizsgálatot orientáció, ill. textúra vizsgálatokra is fel lehetne használni.

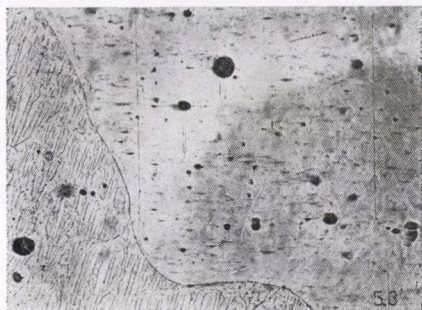
#### 5.2.2. Lágy állapotú, Goss-textúrást transzformátorlemezek lemágnesezett állapotban

Mint említettük a Goss-textúrást lemezeknél a kristallitok felülete az {110} síkokhoz van közel, a  $\langle 001 \rangle$  irányok pedig a hengerlési irány körül csoportosulnak.

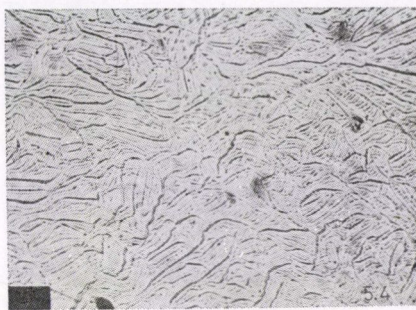
Az 5.3 kép Goss-textúrást lemez olyan kristallitjairól készült Bitter-ábrát mutat be, amelyek közül a kép nagyobb részét kitöltő felülete pontos (110) sík. A könnyű mágnesezési irány itt mindig a fő domén határvonallal párhuzamos. Nincsenek rajta  $90^\circ$ -os és  $45^\circ$ -os faltalálkozások mint az {100} felületeken, a fő-domén falak mind  $180^\circ$ -osak.



Az olyan szemcsék Bitter-ábráján, ahol a dőlési szög  $2-3^\circ$ , még láthatóak a fődoménhatárvonalak is. Nagyobb dőlési szögeknél ( $\sim 6^\circ$ ) a fődomén vonalak eltűnnek, ez látszik az 5.3. ábra bal oldali szemcséjén, de a könnyű mágnesezési irány itt is felismerhető, hiszen a lándzsahegy domén alakja erre nézve szimmetrikus [21].



5.3. ábra



5.4. ábra

A nagyobb, kb.  $8^\circ$ -os dőlési szöghöz tartozó bonyolultabb struktúrában szintén nem nehéz felismerni a könnyű mágnesezési irányt (pontosabban annak a felület síkjára merőleges komponensét, hiszen  $[001]$  most nincs a felület síkjában), mert a szerkezet erre az irányra nézve tükrözés-szimmetrikus [43].

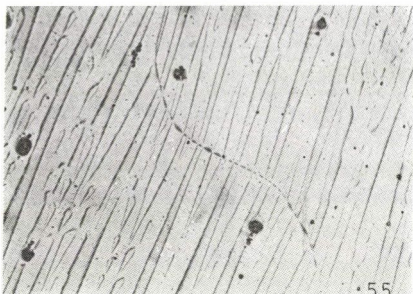
Az egyre nagyobb dőlési szögekhez tartozó Bitter-ábrákon megfigyelhető, hogy amint nő a dőlési szög, nő a mellékdomének száma is, egyre finomabban osztott a szerkezet. Az 5.4. Bitter-kép közel  $(111)$  síkban levágott  $0,5$  mm vastag egykristály szeletről készült. A bonyolult Martin-féle szerkezet igen apró doménekből áll, de minden bonyolultsága ellenére is megfigyelhető a Bitter-vonalakban egy három fogású szimmetria.

### 5.2.3. Különleges konfigurációk lágy állapotú polikristályos transzformátorlemezen

Az 5.5. fotón a domének csatlakozásait figyelhetjük meg a szomszédos kristallitok határáin. Az ábra két közel  $(110)$  felületű kristallit S alakú határvonala körüli kialakult szerkezetet mutat. A  $[001]$  könnyű mágnesezési irány mindkét szomszédos kristallitban közelítőleg azonos a doménhatárvonalak irányával, és ezek az irányok kicsiny, mintegy  $5^\circ$ -os szögben hajlanak egymáshoz. Ennek megfelelően az átmenet szinte folytonos, mert a kristallithatáron nem keletkeznek felületi pólusok, amelyek szórt mágneses terét ellensúlyozni kellene.

Az 5.6. képen két olyan kristallitszemcse találkozását látjuk, amelyek közül az egyiknek a felülete pontosan  $(100)$  sík, a másik szemcse dőlésszöge  $\sim 4^\circ$ . Itt a könnyű irányok hajlásszöge a szomszédos kristallitokban az előzőnél nagyobb, kb.  $15^\circ$ . A mágnesezés normális komponensének a folytonosságához, tehát a pólusmentességhez az kellene, hogy a kristallithatár a két könnyű mágnesezési irány szögfelezője mentén haladjon. Jól látható a kiegészítő doménszerkezet kialakulása azokon a helyeken, ahol ez kevésbé teljesülne. A kialakult mellékdomének számára viszont már jól teljesül a pólusmentesség feltétele, és az is megfigyelhető, hogy az 1.





5.5. ábra



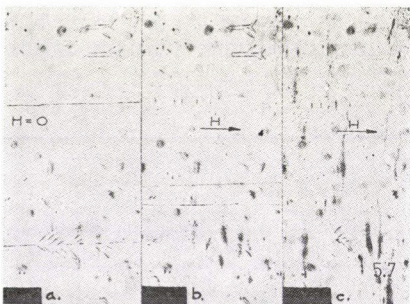
5.6. ábra

krisztallit mellékdóménjeinek határvonala csatlakozik a 2. krisztallitnak a fényképen szaggatott vonallal bejelölt fődomén határvonalaihoz.

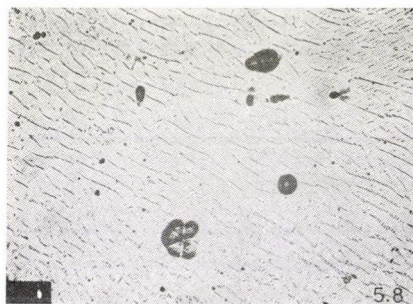
Az 5.3. fotón olyan kiegészítő doméneket is megfigyelhetünk az (110) felületű szemcsében, amelyek nem mágneses zárványok körül alakultak ki a zárványüreg magnetosztatikus energiájának csökkentésére.

#### 5.2.4. Lágy állapotú, polikristályos lemezek vizsgálata külső mágneses térben

Az 5.7. fényképsorozat (100) felületű krisztallitról készült különböző térerősségeknél, miközben lemágnesezett állapotból telítésig mágneseltük a jelzett irányban. Az 5.7.a fotó a lemágnesezett állapotot mutatja. Az 5.7.b képen faleltolódást észlelünk, viszont a c képen már telítésben van az anyag. (110) felületű krisztallitok mágnesezésekor hasonló változásokat láttunk, ha a mágneses tér közel [001] irányú volt.



5.7. ábra



5.8. ábra

Viszonylag nagy térerősségeig ( $H \sim 20$  Oe) itt is csak faleltolódásokat tapasztaltunk. Ha viszont a mágneses tér iránya ugyanezen szemcsénél [110], akkor már lényegesen kisebb térerősségnél felbomlik az eredeti szerkezet, és az 5.8. fotón látható szerkezet kialakulását figyelhetjük meg. Ez minden bizonnyal a 3.2.2. pontban leírt parketta szerkezettel azonos, amely a 3.3. szakasz szerint képes [110] irányban is fluxust vezetni. Meg kell jegyezni azonban, hogy a doménhatárvonalak közül sok itt a Bitter módszer számára láthatatlan marad, mert ebben az esetben a 4.2. pontban említett  $V$  vonalak kialakulásáról van szó [19].

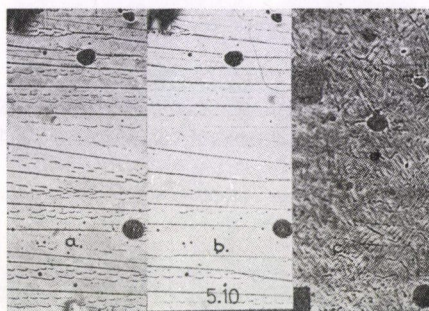


### 5.2.5 Külső rugalmas feszültségek hatása a doménszerkezetre lágy állapotú lemezen

(100) felületű,  $90^\circ$ -os és  $180^\circ$ -os határokat egyaránt tartalmazó doménszerkezet viselkedését tanulmányozva húzó- és nyomófeszültség hatására azt tapasztaltuk, hogy kis feszültségek esetén a doménhatárok mozgása nagyon hasonló ahhoz, amit kis mágneses tér hatására figyelhetünk meg, azaz a külső rugalmas feszültség szempontjából kedvezőtlen domének területének csökkenése megy végbe a többi domén rovására. Nagyobb feszültségeknél új szerkezetek alakulnak ki, mint például nyomó feszültség hatására az 5.9. képen látható cikcakk ábra. A rugalmas feszültségeknek a mellékdoménekre gyakorolt hatását az 5.10. képsorozaton mutatjuk be. Az 5.10.a, b



5.9. ábra



5.10. ábra

képeken az (110) síkhoz közel álló felületnél az esőcsepp vagy lándzsahegy mellékdomének eltűnnek a  $[001]$  irányú húzófeszültség hatására, mivel ezen felületi képződmények közötti fluxus átvitt a húzófeszültségre merőlegesen mágnesezett kereszt-domének végzik (vö. 3.16. ábra). A magnetoelasztikus hatás miatt most a kereszt-domének energetikailag kedvezőtlenek. Nyomófeszültségek hatására viszont ellentétes értelmű változások történnek, és kialakul a Corner—Mason-féle feszültség-ábra mint ahogyan azt az 5.10.c kép mutatja.

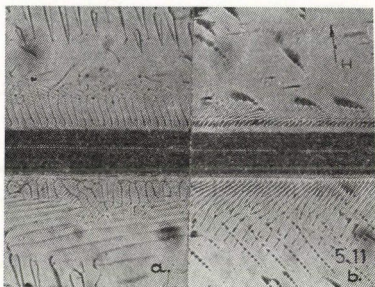
### 5.2.6. Az inhomogén képlékeny alakítás következményei a transzformátorlemez doménszerkezetén

Ezekhez a kísérletekhez olyan képlékeny alakítási módokat alkalmaztunk, amelyeknél a képlékeny alakváltozás zónája kicsiny, és így a mikroszkópban megfelelő nagyításnál egyszerre láthatók az alakított és a képlékeny alakváltozást nem szenvedett részek.

Az 5.11.a fotón karctűvel megkarcolt, közel (110) felületű krisztallitok belsejében látjuk a karcolás környezetét. A képeken megfigyelhetjük, hogy közvetlenül a karcs nyom mellett, kb.  $100\ \mu\text{m}$  távolságig a lágy állapotú anyagok jellegzetes Bitter-ábráihoz képest jelentősen eltérő szerkezet alakult ki: a Bitter-ábra sokkal osztottabb mintázatú. Ez annak a jele, hogy a kedvező irány a mágnesezettség számára ezeken a részeken messze áll a felület síkjától.

A 3.6. pontban leírt Hubert-féle szabályokat alkalmazva valószínűnek tartjuk, hogy a fődomének mágnesezettségei ennél a szerkezetnél  $[100]$  vagy  $[010]$  irányúak,





5.11. ábra



5.12. ábra

tehát nem a felület síkjában vannak. A magnetoelasztikus hatás ugyanis a Fe-3% Si-ban nem elég erős ahhoz, hogy önálló könnyű mágnesezési irányt tűzzön ki, csupán előnyben részesíti a lehetséges könnyű mágnesezési irányok közül azokat, amelyekre a magnetoelasztikus energia minimális. Ha feltételezzük, hogy a közel [110] irányú karcnyom közelében a képlékeny alakítás hatására a felület síkjában nyomófeszültségek ébredtek a [001] irányban vagy húzófeszültségek az [110] irányban, akkor a [001] irány kedvezőtlené vált, és emiatt a [010] és az [100] irányok részesülnek előnyben. Ekkor viszont a magnetosztatikus energia csökkentése érdekében Martin-féle felületi záródomének alakulnak ki.

A képen azt is megfigyelhetjük, hogy a karcnyom közvetlen közelében levő igen finom mintázatú szerkezet és a lágy állapot Bitter-ábrája között egy átmeneti „feszültségábra” is kialakult. A karcnyom közeli feszültségábra a Corner és Mason szerinti II illetve I típusú feszültségábrára emlékeztet (3.3. szakasz).

Az 5.11.b képen kb. 90 Oe erősségű külső mágneses teret alkalmaztunk a mintákra az ábrán jelzett irányban. A mágneses tér viszonylag igen erős volt, hiszen a lágy anyag kb. 30 oerstedes térben már gyakorlatilag teljesen telítésbe megy. A felvételek tanúsága szerint azonban a képlékenyen alakult részeken ennek az értéknek 3-szorosa sem elegendő a telítési állapot eléréséhez. A mechanikai feszültségállapot tehát erősen megnehezíti a mágneses szerkezetek átrendeződéseit. Ennek a ténynek nagy fontossága van a mágneses anyagok technológiájában (5.3. szakasz).

Az 5.12. fotón egy (110) felületű kristallit belsejében Vickers mikrókeménységmérő lenyomatának közelében kialakult Bitter-ábrát láthatunk lemágnesezett állapotban.

A mikrókeménységmérő nyom élei [001] illetve [110] irányúak. [001] irányban eltávolodva a nyom szélétől, ugyanazt a jellegzetes, főként II típusú feszültség ábrát találjuk meg, mint amilyent a karcnyom közelében láttunk az 5.11.a fotón, ahol [001] irányú nyomófeszültséget tételeztünk fel. A mikrókeménység lenyomat feszültségtére feltételezhetően [110] irányban is nyomófeszültség, az ezzel kapcsolatos magnetoelasztikus energia azonban az eredeti mágnesezési irányt teszi kedvezővé, így ebben az irányban is az elméleti várákozásnak megfelelő a Bitter-ábra.

Mágneses térben vizsgálva ezt a szerkezetet ebben az esetben is azt tapasztaltuk, hogy a tér ellenében a feszültségábra rendkívüli stabilitást mutat, és a lágy szerkezetre jellemző értéknél jóval nagyobb térerősség viszi csak telítésbe az anyagot.

Inhomogén képlékeny alakítást jelent tulajdonképpen a polikristályos anyagok homogén képlékeny húzása is. László [44] kimutatta, hogy a fémkristályok rugalmas



anizotrópiája miatt még a köbös kristályszerkezetű, jól hőkezelt polikristályos mintákban is inhomogén eloszlású mikro feszültségek maradnak vissza makroszkóposan homogén képlékeny alakváltozás után. Vasban pl. ez az érték az alkalmazott külső feszültség 35%-át is elérheti. Az 5.13. ábrán szakítógépen 2,5% maradó nyúlást szenvedett minta Bitter ábráját mutatjuk be. Ezeken a felvételeken is láthatjuk a jól ismert feszültségábrákat.

### 5.3. A kivágás műveletének hatása a transzformátor és dinamólemezek doménszerkezetére

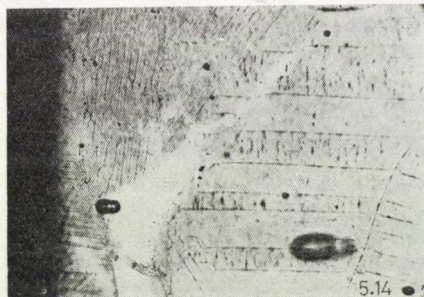
A trafólemezek Bitter-ábráira vonatkozó, fentebb leírt tapasztalatainkat egy gyakorlatban felvetődött probléma megoldásában hasznosítottuk. Meg kellett vizsgálni, milyen mértékben változtatja meg a kivágás művelete a dinamó-, illetve transzformátorlemezek doménszerkezetét és mágneses tulajdonságait, azaz a vágási szélről mekkora mélységben észlelhető a mágneses tulajdonságokat lerontó belső feszültségek jelenléte.

A kivágás erősen inhomogén alakváltozási folyamat, ezért várható, hogy a visszamaradó feszültségek következtében a vágási szél Bitter-ábrái mutatják majd az ismert feszültségábrákat.

Az 5.14. ábra vágási szél környékét mutatja (110) felületű kristályszemcséken, lemágnesezett állapotban. A képeken jól megfigyelhetők a nyomófeszültségre jellem-



5.13. ábra

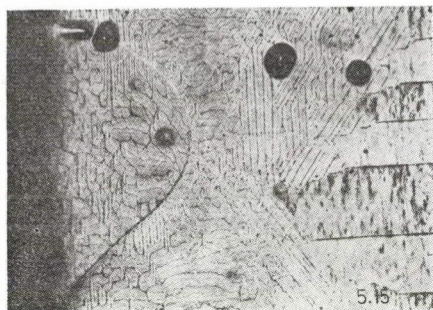


5.14. ábra

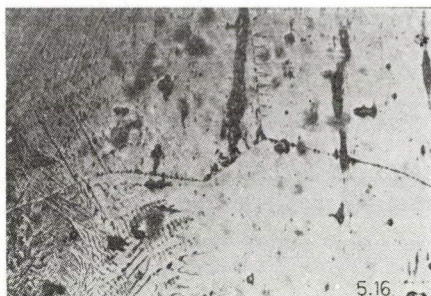
ző I és II típusú feszültségábrák. A lágy állapotú anyagréssz síkja a doménábra tanúsága szerint közel (110), míg a [001] irány, a doménfalak iránya közel merőleges a vágási szélre. A képen a vágási szél közvetlen közelében szintén [001] irányú, de a lágy anyag doménjaihoz képest sokkal apróbb doméneket találunk. Ez erős húzófeszültség jelenlétére utal. A húzófeszültség a magnetoelasztikus hatás következtében kedvezőtlené teszi a záródomének fellépését, ehelyett a magnetosztatikus energia csökkentésére a domének száma nő meg, hogy az ellentétes felületi pólusok minél közelebb kerülhessenek egymáshoz itt az anyagszálon (3.1.1. pont).

Az 5.15. képen különösen jól kivehető egy új típusú, eddig az irodalomban sem említett feszültségábra az I típusú feszültségábra doménjai és a lágy anyagréssz doménjai közötti részen. Itt a fődomének mintegy önmagukkal párhuzamosan, lépcsőzetesen eltolódnak [111] irányban. Nem ennyire világosan, de ugyanez észrevehető az 5.14. fotón is.





5.15. ábra



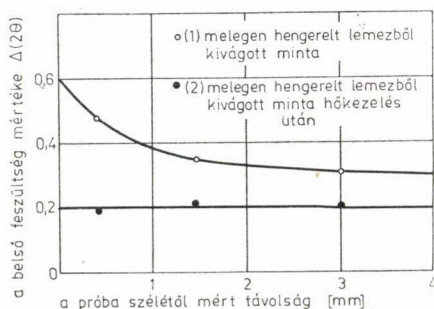
5.16. ábra

A növekvő külső mágneses tér mellett készült felvételek az eddigieknél is határozottabban mutatják, hogy a belső feszültségek jelenléte rendkívül nagy mértékben korlátozza a mágneses szerkezet átrendeződését. A feszültségábrát még a berendezésünkkel előállítható legnagyobb térerősségekkel ( $\sim 600$  Oe) sem tudtuk eltüntetni, (5.16. kép) azaz az anyagot azon a helyen telítésbe vinni. Ebből a viselkedésből arra lehet következtetni, hogy a dinamólemez mágneses tulajdonságai erősen leromlanak a kivágási deformáció által érintett helyeken. Bitter-ábra vizsgálattal megmértük azt a vágási éltől az ép részek irányában mért átlagos mélységet az ún. „behatolási” mélységet, ameddig a belső feszültségek hatása még észlelhető.

A behatolási mélység méréseink szerint a kivágószerszám kopottságától függően 0,9—3,2 mm között váltakozik. Az így mért értékek nagyságrendjének helyességét röntgensugár belső feszültségmérésekkel is ellenőriztük. Egy Debye—Scherrer gyűrű hátsóreflexiós síkkamra felvételén a (311) reflexiónak megfelelő gyűrű kiszélesedését mértük a vágási él közelében a szélétől befelé haladva, különböző mélységekben. A megvilágító nyáláb átmérője 0,5 mm volt, a használt sugárzás hullámhossza 0,710 Å. A mérési eredmények az 5.21. ábrán láthatók. A diagramon a  $\Delta(2\theta)$  vonalfélszélességet ábrázoltuk önkényes egységekben a szélétől mért távolság függvényében. Az 1. görbe a melegen hengerelt anyagból való kivágás utáni állapotot mutatja, a 2. görbe pedig az azt követő rekristallizációs hőkezelés után készült.

A görbék értelmezése nem egészen triviális, mivel a vonalszélesedés mértékét legalább három effektus befolyásolja: 1. inhomogén, térbelileg változó irányú belső feszültség, 2. szemcseméret, 3. textúra.

Miután komolyabb elemzésekre nem volt lehetőségünk, az 5.17. ábra alapján csupán a következőt mondhatjuk: Feltételezve, hogy az anyag a megvizsgált területen kivágás előtt homogén és izotrop volt, minden eltérést a belső érintetlen területekhez képest a kivágás hatásának tulajdoníthatunk, és így megadhatjuk a kivágás által érintett terület határát. Ebben azonban nincs benne az az anyagrész, amelyben még lehetnek homogén belső feszültségek, mert vonaleltolódást nem mértünk. Az ily mó-



5.17. ábra



don becsülhető behatolási mélység is 2 mm körül van kopott szerszámmal történt kivágás esetén, tehát azonos a Bitter-módszer által megadott értékkel, bár a kevés számú mérési pontból ezt nehéz biztosan állítani.

A görbékben az is kitűnik, hogy a vonalszélesség jelentősen alacsonyabb a hőkezelt anyagnál, mint a melegen hengerelt anyagnál a vágási szélről távol. Ez arra mutat, hogy a melegen hengerelt anyagban még jelentős belső feszültségek vannak.

A behatolási mélység itt megadott értékei jelentősek, mivel a kisebb villamos motorok vasmagjainak fogszélessége, illetve transzformátoroknál a vasmaglemez teljes szélessége is csupán néhány mm. A nagyobb villamosgépeknél is nagyon hátrányos azonban a kivágás hatása, mert a légrés szokásos értéke az álló és forgórész között mindössze néhány tized mm, a kivágás következtében a légrés effektív értéke megnövekszik, ami lecsökkenti a légrésben elérhető maximális indukciót.

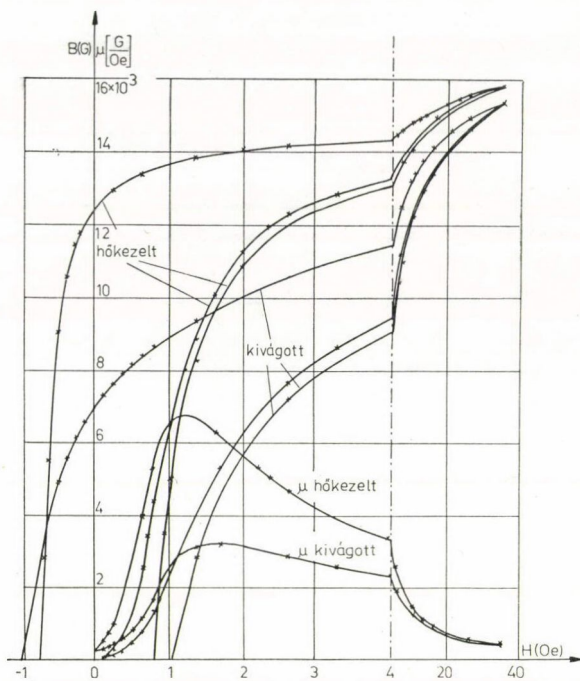
#### *5.4. Dinamólemezek mágneses paramétereinek változása a kivágás műveletének hatására*

A felhasználás szempontjából leglényegesebb a mágneses paraméterek megváltozása a kivágás következtében. Ennek a vizsgálatára egyenáramú hiszterézis görbét vettünk fel a különböző előkezelést kapott mintákon. A méréseket gyűrűalakúra egy lépésben kivágott próbatesteken végeztük átmágnesezéses módszerrel [17]. Indikátorként „Norma” típusú fluxusmérőt használtunk, melynek maximális érzékenysége  $10^{-6}$  weber. A gyűrű adatai:  $r_k=43$ ,  $r_b=30$  mm. Egy mintában a vasmaglemezek száma 20, a lemezvastagság 0,45 mm.

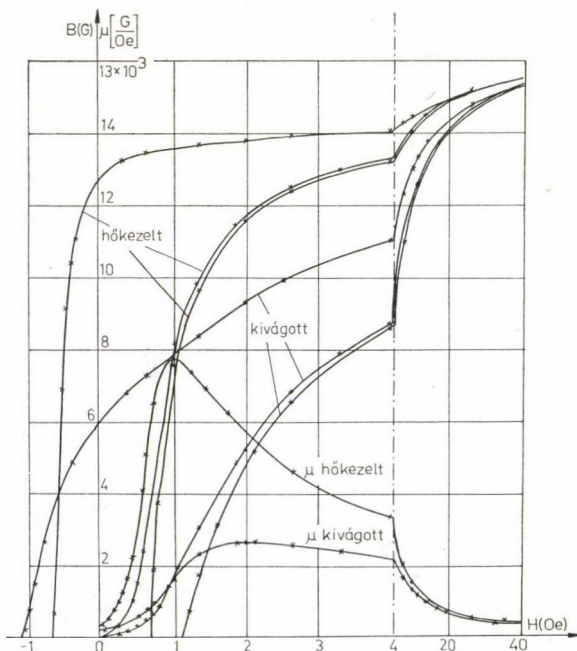
A mérési eredményeket az 5.18.a–e ábrákon tüntettük fel. A hiszterézisgörbe fontosabb adatait a II. táblázatban foglaltuk össze. A méréseket először úgy végeztük, hogy a próbatesteket különböző kopottsági foknak megfelelő kivágószerszámmal, közvetlenül a melegen hengerelt lemezből stancoltuk ki. A hiszterézisgörbe felvétele után az anyagot  $850^\circ\text{C}$ -on 1 órás időtartamú rekrisztallizációs hőkezelésnek vetettük alá. A hőkezelt anyagon megismételtük a mérést. Ezeket az eredményeket látjuk az 5.18.a–c ábrákon. A görbék tanúsága szerint a hőkezelés hatására jelentős javulás következik be a kivágott anyag mágneses tulajdonságaiban. A várakozásnak megfelelően a változások annál nagyobbak, minél kopottabb szerszámmal történt a minta kivágása. A melegen hengerelt anyag azonban eleve tartalmazhat belső feszültségeket, erre már az 5.17. ábrával kapcsolatban is utaltunk. Melegen hengerléskor ugyanis a diszlokációk keletkezése és eltűnése egyidejűleg történik. A maradék belső feszültség mértékét az alakítás sebessége, hőmérséklete és a lehűlés sebessége határozza meg. Az 5.18.a–c görbékben nem tudhatjuk, hogy a hőkezeléskor észlelt változások hányadrésze tulajdonítható kizárólag a kivágás hatásának. Ezért a hiszterézisgörbe méréseket előzetesen hőkezelt anyagból kistancolt próbatesteken is megismételtük. Ezeket az eredményeket látjuk az 5.18.d–e ábrákon és a II. táblázat V–VIII. rovataiban.

Az I. és V., illetve II. és VI. sor összevetéséből kiderül, hogy a melegen hengerelt anyag kivágás előtti hőkezelése kis javulást hoz a mágneses paraméterekben, azonban a hőkezeltet (V–VI) a hőkezeletlenekkel (VII–VIII) összehasonlítva látható, hogy a lényeges effektust valóban maga a kivágás hozza létre.

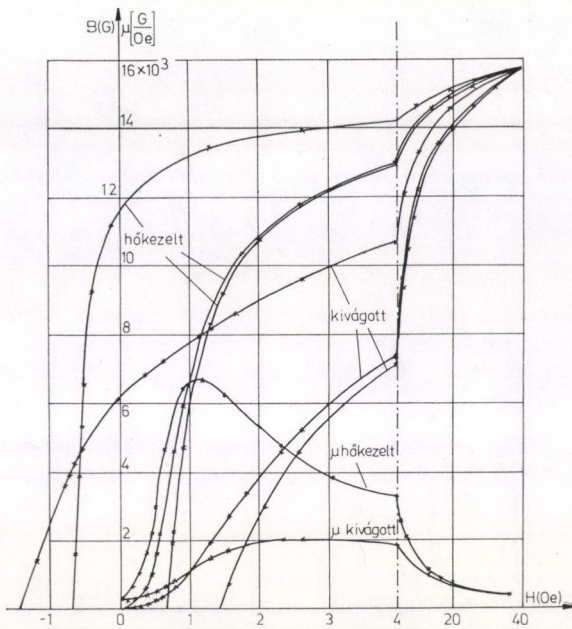




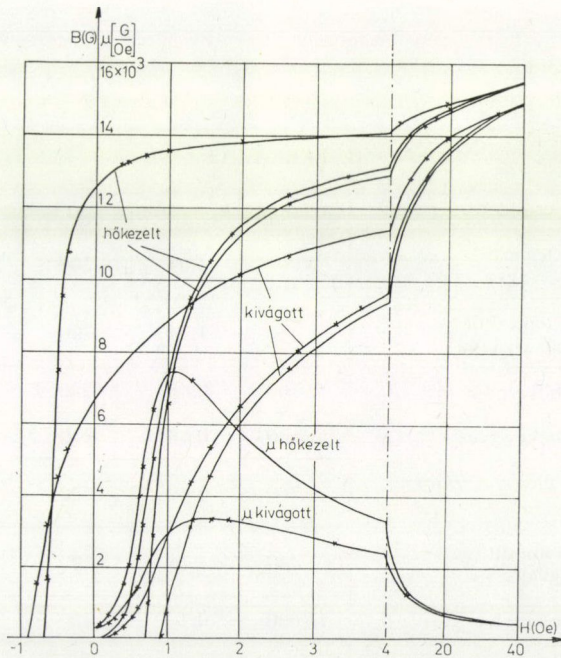
a) Melegenhengerelt lemezből éles szerszámmal kivágva



b) Melegenhengerelt lemezből közepesen kopott szerszámmal kivágva



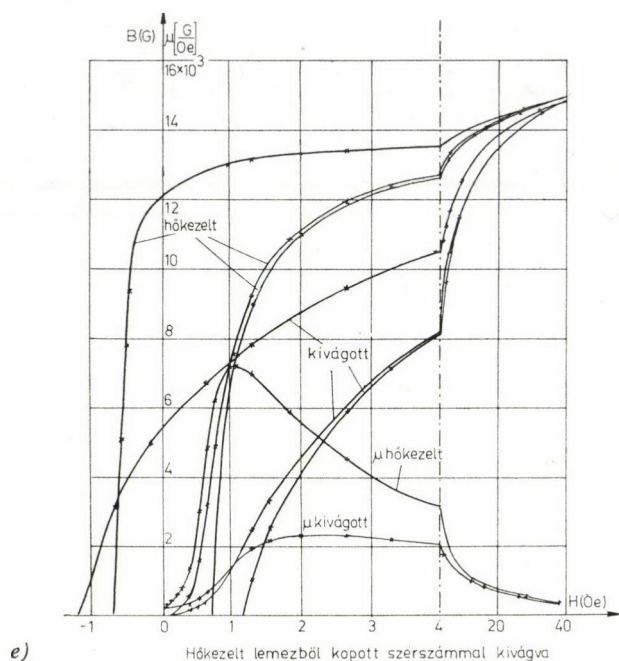
c) Melegenhengerelt lemezből kapott szerszámmal kivágva



d) Hőkezelt lemezből éles szerszámmal kivágva

5.18. ábra





5.18. ábra

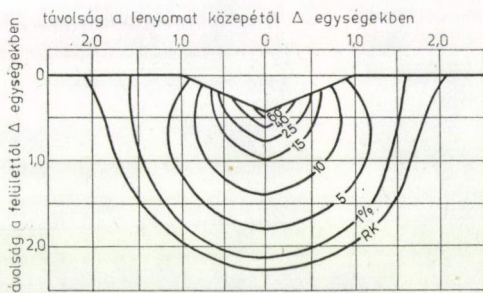
## II. TÁBLÁZAT

A minta állapota	$B_r$ [gauss]	$H_c$ [oersted]	$\mu_0$	$\mu_{\max}$	$W_h$ [ergcm <sup>-3</sup> ]
a) melegen hengerelt lemezből éles szerszámmal kivágva	6 000	1,09	200	2680	6480
b) melegen hengerelt lemezből kopott szerszámmal kivágva	6 100	1,24	200	2000	9170
c) ugyanaz, mint a) hőkezelve	12 700	0,68	240	7800	4520
d) ugyanaz, mint b) hőkezelve	11 600	0,68	240	6700	5480
e) hőkezelt lemezből éles szerszámmal kivágva	6 760	0,92	220	3360	6030
f) hőkezelt lemezből kopott szerszámmal kivágva	5 440	1,16	190	2320	6430
g) ugyanaz mint e) hőkezelve	12 600	0,7	280	7440	5680
h) ugyanaz mint f) hőkezelve	12 100	0,71	250	7260	5100

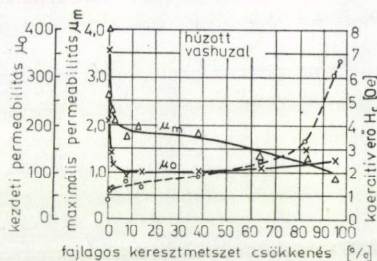
### 5.5. A Bitter-ábrák és a feszültségállapot

A behatolási mélység pontosabb értelmezése érdekében tudnunk kell, hogy mekkora legkisebb deformációtól, illetve belső feszültségtől kezdve mutatkozik a feszültségábra. Ezen minimális deformáció meghatározásához viszont ismernünk kellene a vágási él mentén a maradó deformációs teret, amelyet a Bitter-ábrával összevethetnénk. A vágott él környéki deformációs állapotra vonatkozólag azonban nincsenek adataink.

A felvetett problémához támpontot nyújthat a mikrokeménységmérő nyom környékének vizsgálata, amelyre vonatkozólag *Mulhearn* [45] közöl kísérleti eredményeket. Megállapításai szerint Vickers-piramis benyomódása következtében kialakult maradó deformációs tér voltaképpen egy pontból kiinduló kompressziós alakváltozás, amelynél az azonos deformációjú helyek — a piramishoz egészen közel eső térfogatrészeket kivéve — közelítőleg félgömbfelületekkel jellemezhetők. Az 5.19. ábra szerint, amelyen *Mulhearn* eredményeit közöltük, a maradó és rugalmas deformáció határvonalai a középponttól kb. kétszer akkora távolságban van, mint a piramis nyom oldalélhosszúságának a fele,  $\Delta$ . Az 5.12. Bitter-ábra tanúsága szerint a Bitter-vonalak nyomófeszültséget jeleznek még hatszor ilyen távolságban is, azaz  $r=6\Delta$ -nál. Nyilvánvaló, hogy a plasztikus zóna mögött még messzire kinyúló rugalmas zóna is van, ahol valószínűleg a kompressziós feszültségek dominálnak. Ebben



5.19. ábra



6.1. ábra

a tartományban már minden bizonnyal jó közelítéssel érvényesnek vehetjük egy durva becslés számára a Hertz-féle megoldást, amely izotróp, lineárisan rugalmas feltérbe merőlegesen behatoló,  $P$  erővel terhelt kemény golyó körül kialakuló feszültségterre vonatkozik [46]:

$$\sigma_{rr} = P \cdot (1 - 2\nu) / 2\pi \cdot r^2 = K / r^2, \quad (6.1)$$

ahol  $\sigma_{rr}$  a radiális nyomófeszültség,  $r$  a középponttól mért távolság. Ha  $r=2\Delta$  távolságnál a nyomófeszültséget a  $\sigma_F$  folyási határral vesszük azonosnak, ami Fe-3% Si-nél 37 kpm<sup>2</sup>, akkor  $K$  értéke (6.1)-ben 148 kpm<sup>-2</sup> ·  $\Delta^2$ . A feszültségábra észlelési határánál,  $r=6\Delta$ -nál a nyomófeszültség a most kapott  $K$  értékkel számolva 4.1 kpm<sup>-2</sup>, ami kielégítő egyezést mutat Corner és Mason 3.4. pontban tárgyalt mérési eredményeivel.



## 6. Összefoglalás, konklúzió

A dolgozatban áttekintést adtunk a doménszerkezetvizsgálat elméleti alapjairól különös tekintettel az Fe-3% Si ötvözetre. Irodalmi források alapján megvizsgáltuk a különböző körülmények között kialakuló jellegzetes egyensúlyi doménszerkezeteket, és a kísérleti részben ezeket konkrét példákkal demonstráltuk. A doménszerkezet vizsgálatok során szerzett tapasztalatokat egy iparban felmerült probléma vizsgálatára alkalmaztuk. Nevezetesen, megmértük, hogy a villamos gépek vasmaglemezeinek kivágásakor a kivágás környezetében a lemez szélétől számítva milyen mélységben változik meg a mágneses szerkezet. Megfigyeléseket közöltünk arra vonatkozólag, hogy a kivágás okozta inhomogén képlékeny alakváltozás jellegzetes változásokat hoz létre a doménszerkezetben. Ezt a megváltozott szerkezetet, az úgynevezett feszültségábrát mikroszkópos Bitter-ábra vizsgálattal jól el lehet különíteni a képlékeny deformáció által nem érintett, ép részekről. Ennek alapján definiáltunk egy behatolási mélységet, amelynek értéke a kivágó szerszám kopottságától függően 0,9–3,2 mm között volt. Ez az érték jól egyezett a röntgensugár-módszerrel mért belső feszültség alapján definiálható behatolási mélységgel.

A kivágás hatását mágneses paraméterek mérésével is követtük. Megállapítottuk, hogy a kivágás hatására jelentős romlás következik be a lágymágneses paraméterekben. Így pl. a remanencia felére, a maximális átlagos permeabilitás felére-harmadrészére csökken, a koercitív erő 30–60%-kal, az átlagos hiszterézisveszteség 6–26%-kal nő.

A Bitter-ábra érzékenysége, azaz a minimális észlelhető belső feszültségnek a mérésével pontosítottuk a behatolási mélység fogalmát. Az észlelt minimális feszültség kb.  $4 \text{ kpm}^{-2}$ , és ez az érték nem áll messze *Corner* és *Mason* [29] más módon mért adataitól.

A Bitter-módszerrel mért behatolási mélység definíciója azonban ennek ellenére meglehetősen önkényesnek hat. Az egyértelműen kiderült ugyan méréseinkből, hogy az alakítás rontja a lágymágneses tulajdonságokat, és a változás monoton nő a behatolási mélységgel, de azok mértéke az alakítás mértékétől is erősen függ, tehát nem egyformán történik a behatolási mélység határolta külső sáv különböző részein. Irodalmi források szerint [17] a képlékeny alakítás már viszonylag kis deformációknál nagy változásokat okoz a mágneses tulajdonságokban. A 6.1. ábrán hidegen húzott vashuzalra vonatkozó mérés eredményét látjuk, amelynek tanúsága szerint a legnagyobb változások a mágneses paraméterekben,  $H_c$ -t kivéve, már 10% redukciónál kisebb alakítások esetén bekövetkeznek. Így pl. a kezdeti permeabilitás durván harmadrészére, a maximális permeabilitás felére csökken. A koercitív erő növekedése is másfélszeres, de jelentősebb változások  $H_c$  esetében csak 80%-nál kezdődnek.

A behatolási mélység definíciójával kapcsolatban felvetődött problémák ellenére úgy érezzük, hogy a jelen munka bebizonyította a kísérleti doménszerkezet-vizsgálat hasznosságát a mágneses anyagok anyagvizsgálatában.

## KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönetemet fejezem ki *Prohászka János* akadémikusnak, aki a problémára irányította a figyelmet és elsősorban *Kovács István* professzor úrnak, aki a téma részletesebb kidolgozására ösztönzött, és mindvégig figyelemmel kísérte a munkámat, értékes tanácsokat adva.

Köszönet illeti *Varga László* tanársegédet, aki a röntgen belső feszültségmérést elvégezte.



A szemcseorientált mintákért a Csepeli Fémműnek, a dinamólemezekért az Egyesült Villamosgépgyárnak, az egykristályokért a Központi Fizikai Kutató Intézetből *Takács Jánosnak* tartozom hálával.

Sok önzetlen segítséget kaptam ezenkívül korábbi munkahelyemtől, a Villamosipari Anyagtechnológia Tanszéktől, melyért nagyon hálás vagyok.

## IRODALOM

1. A. Berkovitz and E. Kneller: Magnetism and Metallurgy, Academic Press, New York, 1969.
2. S. Chikasumi: Physics of Magnetism, Wiley, New York, 1964.
3. W. F. Brown, Jr.: Micromagnetics, Wiley, New York, 1963.
4. W. F. Brown, Jr.: Magnetoelastic Interactions, Springer, Berlin, 1966.
5. H. Kronmüller: Magnetism and Magnetic Materials, ed. C. D. Graham et al., New York, 1975. p. 1006.
6. H. Kronmüller: Moderne Probleme der Metallphysik, ed. A. Seeger, Springer, Berlin, 1966.
7. C. Kittel, Rev. Mod. Phys. 21, 541, 1949.
8. Sz. V. Vonszovszkij: Magnetizm, Nauka, Moszkva, 1971.
9. Kovács I., Zsoldos L: Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
10. A. Hubert: Dissertation, Univ. München, 1965.
11. J. Goodenough, Phys. Rev. 102, 356, 1956.
12. L. Spacek, Czech. J. Phys. 9, 186, 1959.
13. B. A. Lilley, Phil. Mag. 41, 792, 1950.
14. C. D. Graham, Jr. and P. W. Neurath, J. Appl. Phys. 28, 888, 1957.
15. S. Chikasumi, J. Phys. Soc. Japan 10, 523, 1955.
16. J. W. Shilling and G. L. Houze, Jr., IEEE Trans. Mag. 10, 195, 1974.
17. R. M. Bozorth: Ferromagnetism, D van Nostrand, Princeton, 1951.
18. A. Hubert, Z. Physik 198, 414, 1967.
19. V. D. Dülgerov, J. F. Gyegtyarev, Fiz. Kriszt. 5, 809, 1960.
20. H. J. Williams, R. M. Bozorth, and W. Shockley, Phys. Rev. 75, 155, 1949.
21. W. S. Paxton and T. G. Nilan, J. Appl. Phys. 26, 994, 1955.
22. A. Sz. Sur, U. N. Dragosanszkij, Fiz. Met. Met. 22, 702, 1966.
23. N. Bär, A. Hubert und W. Jillek, J. Mag. Mat. 6, 242, 1977.
24. D. H. Martin, Proc. Phys. Soc. B 70, 77, 1957.
25. L. Néel, J. phys. Radium 5, 241, 1944.
26. H. Träuble, Z. Metallk. 53, 211, 1962.
27. B. Passon, Z. angew. Phys. 16, 81, 1963.
28. W. D. Corner and J. J. Mason, Proc. Phys. Soc. 81, 925, 1963.
29. W. D. Corner and J. J. Mason, Brit. J. Appl. Phys. 15, 709, 1964.
30. F. Bitter, Phys. Rev. 38, 1903, 1931.
31. C. Schwink and H. Murrmann, Z. angew. Phys. 13, 192, 1962.
32. J. Kaczér, Czech. J. Phys. 5, 239, 1955.
33. C. A. Fowler and E. M. Fryer, Phys. Rev. 94, 52, 1954.
34. V. W. Fuller and M. E. Hale, J. Appl. Phys. 31, 238, 1960.
35. A. R. Lang and M. Polcarova, Appl. Phys. L. 1, 13, 1962.
36. W. H. Bergmann, Z. angew. Phys. 8, 559, 1956.
37. J. Kranz, A. Hubert und R. Müller, Z. Physik 180, 80, 1964.
38. W. C. Elmore, Phys. Rev., 54, 309, 1938.
39. D. J. Craik, J. Appl. Phys. 38, 931, 1967.
40. J. Kranz und A. Hubert, Z. angew. Phys. 15, 220, 1963.
41. I. pl. L. A. Welo, Phil. Mag. 3, 396, 1927.
42. L. Ilgen und J. Edelmann, Prakt. Metallographie 6, 231, 1966.
43. R. A. McCurrie, P. J. Martin and S. J. Ashurst, J. Mat. Sci. 10, 1788, 1975.
44. F. László, J. Iron Steel Inst. 147, 173, 1943.
45. T. O. Mulhearn, J. Mech. Phys. Solids 7, 85, 1959.
46. H. Hertz, J. Reine Angew. Math. 92, 156, 1881.



MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADEMIA  
KÖNYVTÁRA

Kiadja a Magyar Tudományos Akadémia  
Felelős szerkesztő: Pál Lénárd

79-5770 — Szegedi Nyomda  
Felelős vezető: Dobó József igazgató

Felelős kiadó: az Akadémiai Kiadó igazgatója  
Technikai szerkesztő: Turchányi György  
Műszaki szerkesztő: Marton Andor

A kézirat nyomdába érkezett: 1979. XII. 6. — Terjedelem: 8,75 (A/5) ív









Ára: 12,—  
Előfizetés éventenként: 72,— Ft

INDEX: 26491 ISSN 0025—0104
--------------------------------

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Horváthy Péter:</i> Általános mechanikai rendszerek geometriai leírása .....	127
<i>Sáray István:</i> A ferromágneses doménszerkezet közvetlen megfigyelése Fe-3 % Si transzformátor- lemezen .....	181

307226

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

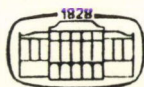
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR  
ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
PÁL LÉNÁRD

XXVIII. KÖTET

3. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1980



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10-10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár  
Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII. Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 72 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázó szöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

# NUKLEON ÉS MAG TÖLTÉSCSERÉLŐ KÖLCSÖNHATÁSA\*

LOVAS REZSŐ

az MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen

## TARTALOMJEGYZÉK

I. BEVEZETÉS .....	226
II. ELMÉLETI ALAPOK ÉS KÍSÉRLETI TAPASZTALATOK .....	227
1. §. A Lane-modell .....	227
2. §. A csatolt csatornás módszer és közelítései .....	231
3. §. Az izovektor potenciál tulajdonságai .....	235
1. Aszimmetriatag a nukleon optikai potenciáljában .....	235
2. A töltéscserélő nukleon—nukleon kölcsönhatás ( $p, \bar{n}$ ) szóráshoz .....	236
3. Az aszimmetriatag meghatározása mikroszkopikus számításokkal .....	241
4. Lane-modell-analizisek ( $p, \bar{n}$ ) szóráshoz .....	244
III. ÁTLAGOS ÉS FLUKTUÁLÓ LANE-POTENCIÁL .....	248
4. §. A Lane-modell konzisztenciája .....	248
1. Lane-potenciál ( $p, p$ ) és ( $p, \bar{n}$ ) analizisből .....	249
2. Aszimmetriapotenciál rugalmas proton- és neutronsóráshoz .....	256
3. Az átlagos paraméterek konzisztenciája és a fluktuációk .....	262
5. §. Fluktuációk páros-páros magok aszimmetriapotenciáljában .....	265
1. Összefüggés az aszimmetriapotenciál ingadozása és a ( $p, \bar{n}$ ) (AAS) átmenetek között .....	265
2. A $^{56}\text{Fe}$ ( $p, \bar{n}$ ) és az $^{40}\text{Ar}$ ( $p, \bar{n}$ ) folyamat leírása Lane-potenciállal .....	268
6. §. Páros-páratlan fluktuációk az aszimmetriapotenciálban .....	270
1. Modell zárt héjjal szomszédos magon végbemenő töltéscsere leírására .....	271
2. A modell gyakorlati alkalmazása .....	275
3. A $^{91}\text{Zr} + p$ rendszer vizsgálata .....	276
4. A $^{25}\text{Mg}$ ( $p, \bar{n}$ ) és az $^{27}\text{Al}$ ( $p, \bar{n}$ ) szórási vizsgálata .....	281
5. Statikus és dinamikus hatások .....	285
IV. TÖLTÉSCSERE DEUTERONLEFOSZTÓ REAKCIÓKBAN ÉS A ( $d, \bar{n}$ ) KÜSZÖB- HATÁS .....	286
7. §. Csatolt csatornás modellek a küszöbhatás leírására .....	286
1. A töltéscsere hatása lefosztó reakciókban .....	286
2. Korábbi modellek és kritikájuk .....	287
3. A félmikroszkopikus modell deuteronlefosztó reakcióra .....	289
8. §. A $^{90}\text{Zr}$ ( $d, p$ ) és ( $d, \bar{n}$ ) reakció leírása a $\bar{n}$ -küszöb környékén .....	292
1. A korábbi analizisek sajátosságai .....	292
2. A küszöbhatás javított leírása .....	293
3. A javított leírásmód viszonya a korábbihoz .....	296
V. ÖSSZEFOGLALÁS .....	297
UTÓSZÓ .....	299
FÜGGELÉK: A (6.16) egyenlet levezetése .....	299
HIVATKOZÁSOK .....	301
A DOLGOZAT EREDMÉNYEIT TARTALMAZÓ CIKKEK .....	304

\* Kandidátusi értekezés. Érkezett 1978. okt. 31.



## I. BEVEZETÉS

Neutrontöbbletes magokon előidézett  $(p, n)$  reakciókban *Anderson* és *Wong* a végmag egyik állapotára különlegesen erős átmenetet talált [An-61]. Kiderült, hogy ezen végállapot — eltekintve a töltésszámtól — azonos szerkezetű a céltárgymag (célmag) alapállapotával, ezért az alapállapot izobár analóg állapotának (IAS) nevezték el. Mivel e folyamat a rugalmas szórástól csak a töltéscserében — és az energiamérlegben — különbözik („kvázielasztikus”), ezért annak mintájára a nukleon és a mag egésze közötti kölcsönhatásnak tulajdonítható. Leírására Lane a nukleon és a mag rugalmas ütközéséről számot adó optikai potenciálba egy töltéscserélő tagot vezetett be [La-62a], és ezzel a rugalmas és a kvázirugalmas nukleonszórást egymással kapcsolatba hozta.

A 60-as években e modellt változatos értelmezésben bár, de széles körűen alkalmazták az IAS-ra vezető  $(p, n)$  szórás (a következőkben:  $(p, \bar{n})$ ) leírására [Sa-69], valamint a  $(d, p)$  és a  $(d, \bar{n})$  (IAS) reakció egymásra hatásának vizsgálatában [Sc-69a, Co-69]. Fő vonásaikban sikerült a  $(p, \bar{n})$  folyamatokat a nukleonok közötti töltéscserére visszavezetve, azaz mikroszkopikus reakciómodellekkel is leírni [Cl-69, Ba-69] és a Lane-potenciál töltéscserélő tagját magszerkezeti módszerekkel is kiszámítani [Zi-68a].

A 70-es években a hatáskeresztmetszet pontosabb mérési technikája újabb lendületet adott a  $(p, \bar{n})$  vizsgálatoknak. Nyilvánvalóvá vált a paraméterek érzékenysége a magszerkezet részleteire. Mégis, a  $(p, \bar{n})$  analízisek és a szaporodó magszerkezeti számítások [Do-72, Né-74] általános tapasztalatainak a birtokában az egyazon magon végbemenő  $(p, p)$ ,  $(p, \bar{n})$  és  $(n, n)$  folyamatok Lane-modellbeli konzisztens leírására tett kísérletek biztatók [Ca-75]. A szórás mikroszkopikus modelljének megbízhatósága is megnövekedett az antiszimmetrizálás jelentőségének felismerésével, s a  $(p, \bar{n})$  szórás értelmezésében hatásos eszköznek bizonyult [Do-75]. Az utóbbi években derült ki az is, hogy a korábban tisztán direktnek vélt kvázielasztikus szórásban több lépcsős folyamatok is szerepet játszanak [Ri-73, Am-74, Ma-76]. A Lane-modelles analízis ezekről csak a fenomenologikus paraméterek szabálytalan viselkedéséből vesz tudomást [Gr-75], és nem tudja tisztán elkülöníteni a magszerkezeti hatásoktól. Több munka tárgyalta a  $\bar{n}$ -küszöbnek a  $(d, p)$  hatáskeresztmetszetre gyakorolt hatását [Co-71, Za-73]. Az eredmények numerikus egyezés tekintetében imponálók, azonban az analízis elvi alapjait megnyugtatóan nem tisztázták.

Vizsgálataink ezekhez a fejleményekhez csatlakoznak. Először is néhány következetesen végigvitt analízisben ellenőriztük, hogy a magszerkezeti és a reakciódinamikai ingadozások érvényben hagyják-e a Lane-potenciál konzisztenciáját, azaz azt a tulajdonságát, hogy a  $(p, p)$ , a  $(p, \bar{n})$  és az  $(n, n)$  folyamatot ugyanazon paraméterekkel írja le. Ennek során szembesítettük az egyedileg illesztett [Ho-73b] és az átlagos [Ca-75] paraméterek konzisztenciáját feltételezők álláspontját — az utóbbiakat igazoló eredménnyel.

Ezután megvizsgáltuk, lehet-e valamilyen értelmet tulajdonítani az egyedileg illesztett paraméterek ingadozásának. Néhány példán úgy találtuk, hogy a fluktuációk oka a Lane-modellnek a mikroszkopikus modell sugallta egyszerű módosításai segítségével behatárolható: héjeffektusok, direkt impulzusmomentum-átadás vagy törzsgerjesztéssel járó több lépcsős folyamatok felelősek érte. E két témával foglalkozik a III. fejezet.



Végül hozzájárultunk a deuteronlefosztó (-stripping) reakció végállapotában fellépő  $p-\bar{n}$  csatolás leírásának tisztázásához (IV. fejezet). Az e célra szolgáló csatolt csatornás formalizmus elvileg is kifogástalan levezetését adtuk; a nyert egyenletek *Zimányi* és *Gyarmati* korábban proponált formuláival [Zi-68b] lényegében ekvivalensek. Egy példán megmutattuk, hogy ez a modell a  $\bar{n}$ -küszöb ( $d, p$ )-beli hatásának kielégítő magyarázatát adja.

Mielőtt az itt vázolt munkát részletesen bemutatnánk, a II. fejezetben áttekintjük azokat a főbb jelenségeket, amelyekben a nukleon és a mag töltéscserélő kölcsönhatása fellép, röviden összefoglaljuk az e jelenségek analízise segítségével a kölcsönhatásról szerzett ismereteket, és ismertetjük a leírás technikai eszközét, a csatolt csatornás módszert.

Vizsgálataink konklúzióit az V. fejezetben foglaljuk össze.

## II. ELMÉLETI ALAPOK ÉS KÍSÉRLETI TAPASZTALATOK

### 1. §. A Lane-modell

A nukleonok közötti kölcsönhatás magerő-tagjának töltésfüggetlensége az izospinfüggést

$$V(1, 2) = v_0 + v_1 \vec{t}_1 \cdot \vec{t}_2 \quad (1.1)$$

alakúra korlátozza. A többi alapvető szimmetriatulajdonság a  $v_i$  tagok távolságfüggését, továbbá meghatározott egyszerű alakú sebesség- és spinfüggését engedi meg [Fo-70a]. Mivel

$$\vec{t}_1 \cdot \vec{t}_2 = t_{1z} t_{2z} + \frac{1}{2} (t_{1+} t_{2-} + t_{1-} t_{2+}), \quad (1.2)$$

és  $t_{\pm} = t_x \pm it_y$  izospinléptető operátor [Me-61a], ezért  $V(1, 2)$  neutront és protont, azaz töltést kicserélő tagot tartalmaz. Ez a tag pl. nukleonbombázásos reakciókban töltéscserélő átmenetet okozhat. Az ilyen átmenet akkor a legerősebb, ha a mag szerkezete a töltéscserétől eltekintve változatlan marad, vagyis ha a folyamat az alapállapot IAS-ára vezet. A Pauli-elv ilyen átmenetet neutrontöbbletes mag protonbombázásakor vagy protontöbbletes mag neutronbombázásakor enged meg. A továbbiakban neutrontöbbletes célmagokra szorítkozunk.

Az állapotokat izobár analogonjuktól csak a töltésszám, tehát az izospin vetülete különbözteti meg. Neutrontöbbletes mag alapállapot  $T_0$  izospinjé a  $z$ -vetület  $(N-Z)/2$  kvantumszámával egyenlő, ezért az alapállapot — csak az izospin kvantumszámok feltüntetésével — a  $\Phi_{T_0 T_0}$ , az IAS pedig a  $\Phi_{T_0, T_0-1}$  szimbólummal jelölhető.

Az ütköző rendszer

$$H\Psi = E\Psi \quad (1.3)$$

Schrödinger-egyenletében  $H$  a belső mozgás Hamilton-operátorának, a relatív mozgás kinetikus energiájának, valamint a 0 indexű lövedék és a célmagbéli nuk-



leonok — nukleáris és elektrosztatikus — kölcsönhatásának az összege:

$$H = H_0 + K_0 + \hat{v}_0 \equiv H_0 + K_0 + \sum_i \left[ V(0, i) + \left( \frac{1}{2} - t_{0z} \right) \left( \frac{1}{2} - t_{iz} \right) V_C(0, i) \right]. \quad (1.4)$$

Ha az egyéb csatornák jelenlététől és a lövedék és a célmag nukleonjai közötti antiszimmetrizálástól eltekintünk, a teljes hullámfüggvényt

$$\Psi = \Phi_{T_0 T_0} \psi_p \pi(0) + \Phi_{T_0, T_0-1} \psi_{\bar{n}} v(0) \quad (1.5)$$

alakban fejezhetjük ki, ahol  $\pi$  és  $v$  jelöli a proton, illetve a neutron izospin-sajátvektorát,  $\psi$  pedig a relatív mozgás hullámfüggvényét. Az állapotér csonkítása miatt a valóságos kölcsönhatás helyére komplex effektív kölcsönhatás lép [Gl-69]. Az (1.4)-nek és az (1.5)-nek az (1.3)-ba helyettesítésével és  $\langle \Phi_{T_0 T_0} \pi(0) |$ -al, illetve  $\langle \Phi_{T_0, T_0-1} v(0) |$ -al való belső szorzással a

$$(K_0 + V_{pp} + V_C - E_p) \psi_p + V_{p\bar{n}} \psi_{\bar{n}} = 0 \quad (E_p = E - E_{T_0 T_0}), \quad (1.6)$$

$$(K_0 + V_{\bar{n}\bar{n}} - E_{\bar{n}}) \psi_{\bar{n}} + V_{\bar{n}p} \psi_p = 0 \quad (E_{\bar{n}} = E - E_{T_0, T_0-1} = E_p - \Delta E_C)$$

egyenletek adódnak, ahol

$$V_C = \left\langle \Phi_{T_0 T_0} \left| \sum_i \left( \frac{1}{2} - t_{iz} \right) V_C(0, i) \right| \Phi_{T_0 T_0} \right\rangle \quad (1.7)$$

a proton—mag Coulomb-potenciál,  $\Delta E_C$  az analóg állapot gerjesztési energiája, ami nem más, mint a Coulomb-energia izobárok közötti eltolódása [Jä-69],  $V_{ij}$  ( $i, j = p, \bar{n}$ ) pedig a magpotenciál mátrixa. Ez (1.4) és (1.1) szerint a

$$V_0(0) = \sum_i v_0(0, i) + \vec{i}_0 \cdot \sum_i v_1(0, i) \vec{i}_i \quad (1.8)$$

operátornak a mag tömegközéppontja és a lövedék közötti távolságtól függő mátrix-elemeiből áll, amelyek kiszámíthatók a mag hullámfüggvényeinek ismeretében (3. §). E mátrixelemek másrészt makroszkopikusan parametrizálhatók, s most ennek a módját mutatjuk meg.

A célmag állapotterében az (1.8) első tagja izoskalár, a második izovektor. Ennek az állapotternek azon altereiben, amelyeket az izospin vetületének változása feszít ki az összes többi kvantumszám — így az izospin — rögzített értéke mellett, bármely izoskaláris operátor diagonális, és — a vektoroperátorok vetítési tétele miatt [Br-68a] — bármely izovektor-operátor mátrixeleme, az izospinvetülettől független arányossági tényezőtől eltekintve, egyenlő a  $\vec{T} = \sum_{i=1}^A \vec{i}_i$  operátoréval. Ebből következik, hogy választható olyan  $u_0$  és  $u_1$ , amellyel képzett

$$u(r) = u_0(r) + u_1(r) \vec{T} \cdot \vec{i}_0 \quad (1.9)$$

ezen bázison vett mátrixelemei egyenlők az (1.8) operátor mátrixelemeivel. Hogy  $u_0(r)$  és  $u_1(r)$  valóban csak a két objektum távolságától függő gömbszimmetrikus potenciálg, az csak 0 spinű gömbszimmetrikus magra teljesül egzaktul (3. §. 2.).

(1.9) a Lane-féle általánosított nukleon-optikaipotenciál. Az  $u_0$  átlagos és az  $u_1$  aszimmetriatag az (1.8) mátrixelemeivel az

$$\begin{aligned} u_0(r) &= \langle \Phi_{T_0 T_0} | \sum_i v_0(0, i) | \Phi_{T_0 T_0} \rangle = \langle \Phi_{T_0, T_0-1} | \sum_i v_0(0, i) | \Phi_{T_0, T_0-1} \rangle \\ u_1(r) &= T_0^{-1} \langle \Phi_{T_0 T_0} | \sum_i v_1(0, i) t_{iz} | \Phi_{T_0 T_0} \rangle = (T_0-1)^{-1} \langle \Phi_{T_0, T_0-1} | \sum_i v_1(0, i) t_{iz} | \Phi_{T_0, T_0-1} \rangle \\ &= (2T_0)^{-\frac{1}{2}} \langle \Phi_{T_0, T_0-1} | \sum_i v_1(0, i) t_{i-} | \Phi_{T_0 T_0} \rangle = \\ &= [T_0(T_0+1)(2T_0+1)]^{-\frac{1}{2}} \langle \Phi_{T_0} | \sum_i v_1(0, i) \hat{t}_i | \Phi_{T_0} \rangle \end{aligned} \quad (1.10)$$

módokon fejezhető ki, ahol a  $\parallel$  jel ezúttal a mátrixelemek izospintérbeli redukálását jelöli. [A redukált mátrixelem definíciójára a Racah-féle konvenciót fogadjuk el [Me-61b], amely szerint a Wigner—Eckart-tétel a következő alakot ölti:

$$\langle JM | T_q^{(k)} | J' M' \rangle = \frac{(-1)^{2k}}{\sqrt{2J+1}} \langle J' M' k q | JM \rangle \langle J || T^{(k)} || J' \rangle. \quad (1.11)$$

Az (1.10)-nek (1.6)-ba helyettesítésével vagy közvetlenül (1.9)-nek az (1.3)-ba  $V_0$  helyére való beírásával és (1.6) levezetésének megismétlésével a

$$J_{\pm} | JM \rangle = \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} | J, M \pm 1 \rangle \quad (1.12)$$

összefüggést [Me-61a] alkalmazva egyszerűen kapjuk most már az egységes optikai modell protonszórásra vonatkozó egyenleteit, az ún. Lane-egyenleteket:

$$\begin{aligned} \left[ K_0 + u_0 - \frac{T_0}{2} u_1 + V_C - E \right] \psi_p + \sqrt{\frac{T_0}{2}} u_1 \psi_{\bar{n}} &= 0, \\ \left[ K_0 + u_0 + \frac{T_0-1}{2} u_1 - (E - \Delta E_C) \right] \psi_{\bar{n}} + \sqrt{\frac{T_0}{2}} u_1 \psi_p &= 0 \\ (E_{T_0 T_0} = 0). \end{aligned} \quad (1.13)$$

Az (1.9)-et a neutronszórásra alkalmazva, vagyis  $\Psi = \Phi_{T_0 T_0} \psi_n v(0)$  fennállását feltételezve, a

$$\left( K_0 + u_0 + \frac{T_0}{2} u_1 - E \right) \psi_n = 0 \quad (1.14)$$

optikaimodell-egyenletre jutunk. A protonok hagyományos  $u_p$  és a neutronok  $u_n$  alap- és  $u_{\bar{n}}$  izobár analóg állapotok optikai potenciálját tehát az

$$\begin{aligned} u_p &= V_{pp} = u_0 - \frac{T_0}{2} u_1 \\ u_{\bar{n}} &= V_{\bar{n}\bar{n}} = u_0 + \frac{T_0-1}{2} u_1 \\ u_n &= u_0 + \frac{T_0}{2} u_1 \end{aligned} \quad (1.15)$$

módon fejezhetjük ki.



Hangsúlyozzuk, hogy az (1.9) Lane-potenciál az (1.8)-beli mikroszkopikus kölcsönhatásnak csak az (1.5) által kifejlesztett altérben ekvivalense. Az (1.8) ugyanis általában impulzuszórádát és — az izovektor tag révén —  $|AT| \leq 1$  izospinátadást is képes előidézni, a Lane-potenciál azonban nem.

Az  $u(r)$  komplex potenciált, amely a mag  $R=r_0 A^{\frac{1}{3}}$  sugarával arányos sugarú diffúz élű potenciáltként összege, sokszor célszerűbb

$$u(r) = u_0(r) + 4 \frac{U_1(r)}{A} \vec{T} \cdot \vec{t} \quad \left[ U_1(r) = \frac{A}{4} u_1(r) \right] \quad (1.16)$$

formában felírni. Ugyanis az (1.10) jobb oldalán szereplő függvények olyan egyrészecske-függvényekből építhetők fel, amelyek amplitúdónégyzete normáltságuk miatt  $1/A$ -val arányos. Az  $u_0$   $A$  számú  $1/A$  szerint változó erősségű tag összege, ezért mélysége közelítőleg független  $A$ -tól, az  $u_1$  erőssége viszont  $1/A$ -val arányos. Az így bevezetett  $U_1(r)$  erőssége tehát, akárcsak  $u_0(r)$ -é,  $A$ -tól függetlennek várható, hiszen az  $(N-Z)$ -től való függését is elimináltuk az izospintényezőbe való beleolvasztással.

A Lane-potenciál tagjait konvencionálisan

$$u_0(r) = -V_0(E)f(r_{0R}, a_{0R}, r) - i \left[ W_{0V}(E)f(r_{0V}, a_{0V}, r) - W_{0D}(E)4a_{0D} \frac{df(r_{0D}, a_{0D}, r)}{dr} \right] \\ + V_{s.o.} \lambda_\pi^2 \vec{\sigma} \cdot \vec{t} \frac{1}{r} \frac{df(r_{s.o.}, a_{s.o.}, r)}{dr}, \quad (1.17)$$

$$U_1(r) = (V_{1V} + iW_{1V})f(r_{1V}, a_{1V}, r) - (V_{1D} + iW_{1D})4a_{1D} \frac{df(r_{1D}, a_{1D}, r)}{dr}$$

alakúnak tételezik föl, ahol

$$f(r_0, a, r) = \left[ 1 + \exp \frac{r - r_0 A^{\frac{1}{3}}}{a} \right]^{-1}, \quad (1.18) \\ \lambda_\pi^2 = 2\text{fm}^2, \quad \vec{\sigma} = 2\vec{s},$$

a Coulomb-potenciált pedig egy  $R_C = r_c A^{\frac{1}{3}}$  sugarú homogén töltött gömb potenciáljával közelítik:

$$V_C(r) = \begin{cases} \frac{Zze^2}{2R_C} \left( 3 - \frac{r^2}{R_C^2} \right), & r < R_C \\ \frac{Zze^2}{r}, & r \geq R_C. \end{cases} \quad \left( z = \frac{1}{2} - t_z \right) \quad (1.19)$$

Az így parametrizált Lane-potenciál állandóit szórás kísérletekhez való illesztéssel vagy mikroszkopikus számításokkal határozzák meg. Mielőtt ezek viselkedésére kitérnénk, a mérhető adatok modellünkéből való kiszámításának módjait tekintjük át.

## 2. §. A csatolt csatornás módszer és közelítései

Az (1.13) Lane-egyenletek magreakciók csatolt csatornás egyenleteinek speciális esetét képezik, s a töltéscserélő kölcsönhatástól befolyásolt minden reakció tárgyalható e módszerrel. Ezzel a §-sal nemcsak az a célunk, hogy az e fejezetben összefoglalandó ismereteket megalapozzuk, hanem az is, hogy saját munkánk technikai hátterét megadjuk. Mivel az elasztikus és kváziasztikus nukleonszóráson kívül egyéb folyamatok leírása is célunk, az (1.6)-nál általánosabb formalizmust ismertetünk. Nem kívánunk közvetlenül számolható végformulákat [Co-73a, Ta-74] nyerni, hanem csupán az elmélet szkémájának kifejtésére törekszünk. Az alábbi gondolatmenetben *Fraht*-tól merítettünk [Fr-67].

Az (1.3) Schrödinger-egyenletnek az  $A(a, b)B$  típusú folyamatokat leíró  $\Psi^{(+)}$  megoldását (itt  $b$  véges sok csatornát jelenthet és  $a$ -t is magában foglalja) (1.5) mintájára a

$$\Psi^{(+)} = \sum_b \Phi_b \psi_b^{(+)} \quad (2.1)$$

kifejtéssel közelítjük, ahol a

$$H_0(b) \Phi_b = \varepsilon_b \Phi_b \quad (2.2)$$

egyenletnek eleget tevő  $\Phi_b$  a  $b$  csatornabeli fragmentumok belső hullámfüggvényének szorzata (tehát az (1.5)-beli izospinvektorokat  $\Phi_b$  tartalmazza),  $\psi_b^{(+)}$  pedig a relatív térbeli mozgás hullámfüggvénye. A Hamilton-operátort csatornánként (1.4) mintájára szabdaltuk. Az azonos partíciót jelölő  $b$  csatornák  $\Phi_b \psi_b^{(+)}$  hullámfüggvényei önmagukban teljes rendszert alkotnak, és csak maguk között ortogonálisak. Így (2.1) az állapottér csonkítása ellenére bizonyos értelemben „túl teljes”, s ezért a (2.1) felbontás nem egyértelmű. Ez a többértelműség legegyszerűbben úgy szüntethető meg, ha az (1.3)  $\langle \Phi_b |$ -vel való beszorzásával nyert csatolt egyenletekben a nem-ortogonalitást elhanyagoljuk:

$$(K_b - E_b) \psi_b^{(+)} + \sum_c \langle \Phi_b | \hat{v}_b | \Phi_c \rangle \psi_c^{(+)} = 0, \quad (2.3)$$

ahol  $E_b = E - \varepsilon_b = (\hbar^2/2\mu_b)k_b^2$ ,  $\mu_b$  pedig a redukált tömeg. Ezzel a közelítéssel a csatornák átfedő hullámfüggvényeinek duplán számlálásába beletörődünk. A nem-ortogonalitást figyelembe vevő több számítás arra utal, hogy az így elkövetett hiba nem számottevő [Go-72, Go-74a, b, Co-76].

A  $\Psi^{(+)}$  határfeltételét a szórás kísérlet körülményei

$$\Psi^{(+)} \sim \Phi_a e^{ik_a \bar{r}_a} + \sum_b f_{ab}(\vec{k}_a, \vec{k}_b) \Phi_b \frac{e^{ik_b \bar{r}_b}}{r_b} \quad (r_b \gg R) \quad (2.4)$$

aszimptotikus alakban szabják meg. [Ha legalább egy csatornában mindkét fragmentum töltött, (2.4) helyére a Coulomb-potenciál végtelen hatótávolsága miatt bonyolultabb kifejezés lép [Me-61c].] Az  $f_{ab}$  szórási amplitúdó, mely (2.3) megoldásával határozható meg, a differenciális hatáskeresztmetszettel a

$$\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega} = \frac{\mu_a k_b}{\mu_b k_a} |f_{ab}|^2 \quad (2.5)$$



összefüggésben van. A (2.3—4) peremérték-probléma a Lippmann—Schwinger-integrálegyenletek nyelvén

$$\psi_b^{(+)} = e^{i\vec{k}_a \cdot \vec{r}_a} \delta_{ab} + \frac{2\mu_b}{\hbar^2} \int d\vec{r}'_b G_0^{(+)}(\vec{r}_b, \vec{r}'_b) \sum_c \langle \Phi_b | \hat{v}_b | \Phi_c \rangle \psi_c^{(+)} \quad (2.6)$$

módon fogalmazható át, ahol a szabad részecske  $G_0^{(\pm)}$  Green-függvénye

$$G_0^{(\pm)}(\vec{r}_b, \vec{r}'_b) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{\hbar^2}{2\mu_b} \left\langle \vec{r}_b \left| \frac{1}{E_b - K_b \pm i\varepsilon} \right| \vec{r}'_b \right\rangle = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm i k_b |\vec{r}_b - \vec{r}'_b|}}{|\vec{r}_b - \vec{r}'_b|} \quad (2.7)$$

$$\sim -\frac{1}{4\pi} e^{\mp i \vec{k}'_b \cdot \vec{r}'_b} \frac{e^{\pm i k_b r_b}}{r_b} \left( r_b \gg R, r_b > r'_b; \vec{k}'_b = k_b \frac{\vec{r}_b}{r_b} \right). \quad (2.8)$$

A (2.8) aszimptotikus formát a (2.6)-ba behelyettesítve, ezt (2.4)-gyel összehasonlítva és a

$$\mathcal{T}_{ab} = \langle e^{i\vec{k}'_b \cdot \vec{r}_b} \Phi_b | \hat{v}_b | \Psi^{(+)} \rangle \quad (2.9)$$

átmeneti mátrixelem bevezetésével az

$$f_{ab} = -\frac{\mu_b}{2\pi \hbar^2} \mathcal{T}_{ab}, \quad \frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega} = \frac{\mu_a \mu_b}{(2\pi \hbar^2)^2} \frac{k_b}{k_a} |\mathcal{T}_{ab}|^2 \quad (2.10)$$

képletekhez jutunk.

Írjuk fel a  $B-b$  fragmentációk közötti  $\hat{v}_b$  kölcsönhatást egy

$$u'_b \equiv u_b + V_C = \langle \Phi_b | \hat{v}_b | \Phi_b \rangle = \langle \Phi_b | V_b | \Phi_b \rangle + V_C \quad (2.11)$$

optikai potenciál (ha  $b=n$ ,  $V_C=0$ ) és egy maradék-kölcsönhatás összegeként:

$$\hat{v}_b = u'_b + \tilde{u}_b. \quad (2.12)$$

(Ha pl.  $b=p$  és  $\bar{n}$ ,  $V_b$  pedig a Lane-potenciál, akkor  $u_b = u_0 + u_1 T_z t_z$ ,  $\tilde{u}_b = \frac{1}{2} u_1 (T_+ t_- + T_- t_+)$  mindkét csatornában.) A (2.12) segítségével (2.3) és (2.6)

$$(K_b + u'_b - E_b) \psi_b^{(+)} + \sum_c \langle \Phi_b | \tilde{u}_b | \Phi_c \rangle \psi_c^{(+)} = 0, \quad (2.13)$$

$$\psi_b^{(+)} = \chi_a^{(+)} \delta_{ab} + \frac{2\mu_b}{\hbar^2} \int d\vec{r}'_b G^{(+)}(\vec{r}_b, \vec{r}'_b) \sum_c \langle \Phi_b | \tilde{u}_b | \Phi_c \rangle \psi_c^{(+)} \quad (2.14)$$

alakba átfogalmazható, ahol  $\chi_a^{(+)}$  a

$$\chi_b^{(\pm)} = e^{i\vec{k}_b \cdot \vec{r}_b} + \frac{2\mu_b}{\hbar^2} \int d\vec{r}'_b G_0^{(\pm)}(\vec{r}_b, \vec{r}'_b) u'_b \chi_b^{(\pm)} \quad (2.15)$$

probléma megoldása  $b=a$  és  $(+)$  határfeltétel mellett. Ismerve a  $G^{(+)}$  rugalmas szórási Green-függvény

$$G^{(+)}(\vec{r}_b, \vec{r}'_b) \sim -\frac{1}{4\pi} \chi_b^{(-)*}(\vec{k}_b, \vec{r}'_b) \frac{e^{i k_b r_b}}{r_b} \quad (r_b \gg R, r_b > r'_b) \quad (2.16)$$

$r_b$ -ben aszimptotikus formáját [Fr-67], (2.9) felhasználásával a T-mátrixelemre a

$$\mathcal{T}_{ab} = \langle e^{ik'_b r_b} \Phi_b | u'_b | \Phi_a \chi_a^{(+)} \rangle \delta_{ab} + \langle \chi_b^{(-)} \Phi_b | \tilde{u}_b | \Psi^{(+)} \rangle \quad (2.17)$$

Gell-Mann—Goldberger-formulát nyerjük.

A közelítő módszerek bevezetéséhez egyszerűség kedvéért tekintsünk egy  $a, b$  ( $a \neq b$ ) kétszatornás esetet. Közelítsük a  $\Psi^{(+)} = \sum_c \Phi_c \psi_c^{(+)}$  kifejezést (2.13)  $a$ -ra felírt egyenletében  $\Psi^{(+)} \simeq \Phi_a \psi_a^{(+)}$ -szal. Ekkor (2.11) és (2.12) értelmében ez az egyenlet lecsatolódik ( $\psi_a^{(+)} = \chi_a^{(+)}$ ),

$$\begin{aligned} (K_a + u'_a - E_a) \chi_a^{(+)} &= 0, \\ (K_b + u'_b - E_b) \psi_b^{(+)} &= -\langle \Phi_b | \tilde{u}_b | \Phi_a \rangle \chi_a^{(+)}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

a (2.17) képlet pedig  $b \neq a$ -ra a

$$\mathcal{T}_{ab} = \langle \chi_b^{(-)} \Phi_b | \tilde{u}_b | \Phi_a \chi_a^{(+)} \rangle \quad (2.19)$$

alakot ölti. A (2.18) második egyenletében az első megoldása mint forrástag szerepel; (2.18) az ún. forrástag-módszer [As-69, Ve-73] egy egyszerű esete. A tetszőleges számú csatornára általánosított forrástag-módszerben (2.18) első és második egyenlete helyén is több csatolt egyenlet áll:

$$(K_a + u'_a - E_a) \chi_a^{(+)} + \sum_{a' \neq a} \langle \Phi_a | \tilde{u}_a | \Phi_{a'} \rangle \chi_{a'}^{(+)} = 0, \quad (2.20)$$

$$(K_b + u'_b - E_b) \psi_b^{(+)} + \sum_{b' \neq b} \langle \Phi_b | \tilde{u}_b | \Phi_{b'} \rangle \psi_{b'}^{(+)} = - \sum_{a'} \langle \Phi_b | \tilde{u}_b | \Phi_{a'} \rangle \chi_{a'}^{(+)}. \quad (2.21)$$

A (2.19) a (2.17) egzakt képletnek a torzított hullámú Born-közelítése (DWBA). Levezetéséből világos, hogy (2.18) és (2.19) két egyenértékű módszer. Általánosabban is igaz: a (2.20)—(2.21) forrástag-módszer ekvivalens a Born-közelítéssel [Sa-73a], ha annak torzított hullámait (2.20) típusú csatolt egyenletrendszer határozza meg („csatolt csatornás Born-közelítés”, CCBA).

Modellezzük a bonyolult  $\tilde{u}_b$  maradék-kölcsönhatást minimális számú koordinátát (pl. kizárólag két nukleon távolságát) tartalmazó egyszerű kölcsönhatással; ezzel a folyamatnak csupán a minimális számú szabadsági fokot gerjesztő komponensét hagytuk meg. Ha a (2.18) egyszerűsítést is bevezetjük, kizárjuk a visszatérést a bemenő csatornába, vagyis csak egyetlen lépésben végbemenő folyamatot engedünk meg. Így jutunk a DWBA és a kétszatornás forrástag-módszer szokásos változatához, amely tehát általános fogalmaink szerint ideális direkt folyamatokat ír le; e munkában őket fogadjuk el a direkt folyamat elméleti definíciójának. Az olyan mechanizmust, amely a Born-sor további egy-két tagjával vagy a csatolt egyenletekben további egy-két csatoló taggal írható le, féldirektnek fogjuk mondani.

Ha a csatolt csatornás modellben vagy közelítéseiben kevés csatornát veszünk figyelembe — és gyakorlati okokból csakis ezt tehetjük — az összes bonyolultabb



folyamatot, kiváltképp a közbenső mag létrejöttével lezajló reakciókat, kizárjuk. Erre azért van jogunk, mert a vizsgált energiák magasak (pl.  $(p, \bar{n})$ -re a Lane-modell tipikus alkalmazási területe  $20 \text{ MeV} < E_p < 50 \text{ MeV}$ ), és bennünket pontosan a direkt folyamatoktól kitüntetett átmenetek érdekelnek. Néhány alkalmazott példában (pl. az  $(n, n)$  szórási eredményekkel kapcsolatban) a priori nem mondhattuk volna ki ugyan, hogy a közbenső magon keresztül végbemenő folyamatok elhanyagolhatók, de a forrásmunkák szerzőinek becslései erre az eredményre vezettek, s ebben megbízunk.

Közvetlenül megoldható csatolt radiális egyenleteket úgy kaphattunk volna, ha  $\Psi^{(+)}$ -t (2.1) helyett, a  $\mathcal{J}M$  teljes impulzusmomentum és a  $\Pi$  teljes paritás megmaradását kihasználva, össze nem csatolódó tagokra bontjuk, amelyeket a  $b$  szerinti kifejtésen kívül az  $l_{b,b}$  parciális hullámokba is kifejtünk, csakúgy, mint a (2.4) határfeltételt. A radiális egyenletek számára a  $\Psi^{(+)}$  origóbeli végessége jelent egy-egy újabb határfeltételt. A minden  $\mathcal{J}M\Pi$ -hez és ezzel összeférő minden lehetséges  $l_{a,j_a}$  bejövő parciális hullámhoz tartozó  $N$  egyenletből álló másodrendű radiális egyenletrendszernek  $N$  origóbeli és ugyanannyi aszimptotikus határfeltételi paramétere van; a megoldás tehát egyértelmű. Az aszimptotikus paraméterből a T-mátrixelem kiszámítható. Ez most a fragmentumok  $K_b\sigma_b$  spinvetületének függvénye. A hatáskeresztmetszet ezekből a bemenő csatornabeli spinvetületekre való átlagolással és a kimenőkre való összegzéssel kapható:

$$\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega} = \frac{\mu_a \mu_b}{(2\pi \hbar^2)^2} \frac{k_b}{k_a} \sum_{K_A \sigma_a, K_B \sigma_b} \frac{|\mathcal{T}_{K_A \sigma_a, K_B \sigma_b}|^2}{(2I_A + 1)(2s_a + 1)}. \quad (2.22)$$

Mivel a Lane-egyenletek csatoló potenciálja skaláris (gömbszimmetrikus), csak azonos impulzusmomentumú csatornákat képes összekapcsolni. Így a Lane-egyenletrendszer adott  $(l_p, j_p) = (l_n, j_n)$  értékpárral jellemezhető radiális egyenlet-párok sorozatára esik szét.

A  $(p, \bar{n})$  hatáskeresztmetszet meghatározására (1.6) és (1.13) DWBA-közelítése 2–3% pontosságú, ezért az egzakt megoldás kevésbé használatos.

E munkában az egzakt csatolt csatornás, a forrástag- és a DWBA-módszert egyaránt alkalmaztuk. Az olyan esetekben, amelyekben a közönséges DWBA és a forrástag-módszer egyenértékű, közelítésünket DWBA-nak nevezzük, jóllehet az esetek többségében a számolás a forrástag-módszerrel történt. Számolásainkban a következő programok eredeti vagy céljainkra módosított változatát használtuk: *Hill* paraméterillesztő szórási csatolt csatornás programját, az INCH-et [Hi-67], *Kunz* szórás és transzferreakciók leírására készült csatolt csatornás programját, a CHUCK-ot [Ku-73], *Kunz* DWBA-programját, a DWUCK-ot [Ku-69], *Wilmore* optikaimodell-programját [Wi-65], *Vertse* Gamow-függvény-programját [Ve-72], valamint a *Juhász* és e munka szerzője által többcsatornás rezonanciaállapotok előállítására írt MUSIC programot [Ju-77]. A DWBA-programot *Vertse Tamás*, az optikaimodell-programot ő és *Végh László* adaptálta.



### 3. §. Az izovektor potenciál tulajdonságai

A Lane-potenciál tulajdonságaira mindazon jelenségekből következtethetünk, amelyekben fellép. Az eddig említettekén kívül pl. protonszórásban az összetett rendszer izobár analóg rezonanciáinak (IAR) leírásában [Ro-65, Bo-66, Ve-70, Gy-76], kötött egyrézecske-állapotok [Ho-75, Is-75] és multipólus óriásrezonanciák izospin-felhasadásában [Bo-75] is szerepet játszik. Mivel ezen egyéb jelenségek részben a direkt nukleonszóráséttól eltérő energiatartományban, részben túl közvetett formában adnak információt, tárgyalásuktól eltekintünk. Ugyancsak kívül esik vizsgálati körünkön a feles izospinű összetett részecskék ( ${}^3\text{He}$ - ${}^3\text{H}$ ,  ${}^7\text{Li}$ - ${}^7\text{He}$ ) szórása [pl. Fa-72, Ha-73, An-74].

Összefoglalandó ismereteink lényegében négy forrásból származnak: a rugalmas nukleonszórás tanulmányozásából, a kvázielasztikus ( $p, \bar{n}$ ) szórás Lane-modellbeli és mikroszkopikus analíziséből és magszerkezeti számításokból. A módszereket olyan sorrendben adjuk elő, hogy az  $U_1$ -re nézve minden eredmény az előbb bemutatotaknál pontosabb és árnyaltabb információval szolgáljon. A kiindulópont a legegyszerűbb kísérlet: a rugalmas szórás. Ez ugyan részletes ismereteket nem tár fel, de előfeltétele a ( $p, \bar{n}$ ) szórás korrekt analízisének, és globális képalkotásra a legalkalmasabb. Az izovektor optikai potenciálról legfontosabb ismeretforrásunk a ( $p, \bar{n}$ ) átmenet, ezt ugyanis direkt úton kizárólag az izovektor tag idézi elő. Annak azonban, hogy a ( $p, \bar{n}$ ) szórásról szerzett tudásunkat értelmezhesük, előfeltétele, hogy a folyamat mechanizmusát és a benne fellépő magszerkezeti hatásokat értsük. Erre szolgál a makroszkopikus ( $p, \bar{n}$ ) analízisek bemutatását megelőző két pont.

#### 3. §. 1. Aszimmetriatag a nukleon optikai potenciáljában

Mivel  $u_0 \gg [(N-Z)/A]U_1$ , a nukleonok rugalmas szórása nem elég érzékeny  $U_1$  pontos meghatározására; kvalitatív sajátosságainak megállapítására azonban szilárd módszert nyújt. Legkézenfekvőbb azonos energiájú ( $p, p$ ) és ( $n, n$ ) méréseket összehasonlítani [Ho-63, Sa-67a], ezt a módszert azonban két körülmény zavarja: alkalmas és pontos neutronadat kevés van, és a protonpotenciálba beikta-

tandó  $\Delta \sim Z/A^{1/3}$  Coulomb-korrekciónak [Pe-63] erőssége némileg bizonytalan. (A  $\Delta$ -ra azért van szükség, mert az optikai potenciál mélysége függ a kinetikus energiától, ezt pedig a Coulomb-potenciál befolyásolja.) Mégis, ilyen analízis szolgáltatja az első bizonyítékot, az  $U_1$  komplexségére, és az imaginárius rész alakját, mai ismereteinkkel egyezően, felületen csúcsosnak mutatta [Sa-67a].

Egy izotópláncon végzett ( $p, p$ ) analízisekből az aszimmetriatagra nem vonható le következtetés [pl. Ba-64], mert a héjfluktuációk elnyomják a szabályosságot. Széles magtartományon végzett analízis az ingadozásokat kiátlagolja. Becchetti és Greenlees (BG) az  $A > 40$ -es magtartományt átfogó nagy mennyiségű proton- és neutronszórási adatot sikeresen illesztett szimultán, a protonszórás általános tapasztalatait kifejező  $V_{1V} = 24$ ,  $W_{1D} = 12$  MeV erősségű,  $u_0$ -al egyező alakú aszimmetriatagot feltételezve [Be-69]. Óvatosságra int azonban ezen  $U_1$  elfogadása tekintetében az, hogy utóbb a nukleonpotenciál sugarának tisztán geometriai  $A$ -függését figyelték meg [Ho-70], amely — ha nincs  $r_0$ -ban figyelembe véve, ahogy (3.1)-ben sincs — a protonszórásban megkülönböztethetetlen az izovektor  $(N-Z)/A$ -függés-



től. Sajnos BG protonokra és neutronokra szignifikánsan eltérő  $u_0$ -t kapott, s így a Lane-moddellel összeegyeztethetetlen proton- és neutronpotenciálhoz jutott. Ha bizonyosan tudnánk, hogy e különbséget nem a rögzített paraméterek hibája vagy a mérések egyoldalú kiválasztása okozta, ez az eredmény a Lane-modell korlátozott érvényére utalna. A nyert globális paraméterek (MeV-ben, ill. fm-ben) a következők:

$$\begin{aligned}
 V_0^p(E) &= 54 - 0,32E + 0,4 \frac{Z}{A^{\frac{1}{3}}}, & V_0^n(E) &= 56,3 - 0,32E \\
 W_{0V}^p(E) &= \max \{0,22E - 2,7; 0\}, & W_{0V}^n(E) &= \max \{0,22E - 1,56; 0\} \\
 W_{0D}^p(E) &= \max \{1,18 - 0,25E; 0\}, & W_{0D}^n(E) &= \max \{13 - 0,25E; 0\} \\
 r_{s.o.} &= 6,2, & r_{s.o.} &= 1,01, & a_{s.o.} &= 0,75 \\
 V_{1V} &= 24, & W_{1D} &= 12, & W_{1V} &= V_{1D} = 0 \\
 r_{0R} &= r_{1V} = 1,17, & a_{0R} &= a_{1V} = 0,75 \\
 r_{0V}^p &= r_{0D}^p = r_{1D}^p = 1,32, & r_{0V}^n &= r_{0D}^n = r_{1D}^n = 1,26 \\
 a_{0V}^p &= a_{0D}^p = a_{1D}^p = 0,51 + 0,7 \frac{N-Z}{A}, & a_{0V}^n &= a_{0D}^n = a_{1D}^n = 0,58 \\
 r_C &= 1,149 + 1,788A^{-\frac{2}{3}} - 1,163A^{-\frac{4}{3}},
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

ahol a  $p$  és  $n$  index a proton- és a neutronpotenciál paramétereit különbözteti meg.

### 3. §. 2. $A$ töltéscserélő nukleon—nukleon kölcsönhatás $(p, \bar{n})$ szórásban

Mikroszkopikus  $(p, \bar{n})$  analízissel  $V_{\bar{n}p}$ -t  $U_1$  bevezetése nélkül közvetlenül  $v_1$ -re vezethetjük vissza, ám feltárva a folyamat mechanizmusát, közvetve  $U_1$  további vonásaira is rávilágíthatunk. A mikroszkopikus modellben a (2.19) DWBA-képlet alkalmazásával érhetünk célt, nemcsak konkrétan kiszámolható formula előállítására, hanem szemléletes kép kialakítása tekintetében is. A  $(p, \bar{n})$  átmeneti mátrixelem (2.19) szerint a

$$\mathcal{T}_{p\bar{n}} = \langle \chi_{\bar{n}}^{(-)} | V_{\bar{n}p} | \chi_p^{(+)} \rangle \tag{3.2}$$

alakot ölti, ahol  $V_{\bar{n}p}$ -t mikroszkopikusan

$$V_{\bar{n}p} = \frac{1}{2} \langle \Phi_{T_0, T_0-1} | \sum_i v_1(0, i) t_i | \Phi_{T_0 T_0} \rangle \tag{3.3}$$

határozza meg. Összehasonlításként rögtön megadjuk a makroszkopikus Lane-modell analóg formuláját is:

$$V_{\bar{n}p} = \sqrt{\frac{T_0}{2}} u_1 = 2 \sqrt{\frac{N-Z}{A}} U_1. \tag{3.4}$$

A rugalmas szórásra az optikai modell kielégítő közelítést ad, ezért a  $\chi_p^{(+)}$  és  $\chi_n^{(-)}$  torzított hullámokat még akkor is makroszkopikus optikai modellből határozzák meg, ha  $V_{\bar{n}p}$ -t a (3.3) képlettel számítják. Az (1.13) Lane-féle optikai modellben  $\chi_p^{(+)}$  és  $\chi_n^{(-)}$  a

$$\left[ K_0 + u_0 - \frac{T_0}{2} u_1 + V_C - E \right] \chi_p^{(+)} = 0, \quad (3.5)$$

$$\left[ K_0 + u_0 + \frac{T_0 - 1}{2} u_1 - (E - \Delta E_C) \right] \chi_n^{(-)} = 0$$

egyenletek (+), illetve (-) határfeltételű [(2.15) és (2.8)] megoldása.

A mikroszkopikus modellnek az inelasztikus szórást is magában foglaló nem antiszimmetrikus változatait *Satchler* [Sa-66], *Madsen* [Ma-66], valamint *Glendenning* és *Vénéroni* [Gl-66], antiszimmetrikus formáit *Schaeffer* [Sc-70], *Atkinson* és *Madsen* [At-70], továbbá *Geramb* és *Amos* [Ge-71] fejlesztette ki. A modell lényeges vonásait felépítésének szkematikus ismertetésével érzékeltetjük.

A mikroszkopikus megközelítés akkor alkalmazható, ha a magállapotok héjmodell-hullámfüggvénye ismert. Egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy  $\Phi_{T_0 T_0}$  és  $\Phi_{T_0, T_0-1}$  tiszta konfigurációjú; ilyenkor  $V_{\bar{n}p}$  a  $\sum_i v_1(0, i) t_{i-}$ -nak mint egyrészecske-operátornak a tulajdonságai miatt [Bo-69]  $\langle \varphi_i^{T_0, T_0-1} | \varphi_j^{T_0 T_0} \rangle = \delta_{ij}$  közelítésben a neutrontöbbletthez tartozó  $\varphi_i$  egyrészecske-pályákra való összeggő fajul.

A (3.2) az izospin-szétcsatoláskor fellépő  $(2T_0)^{-\frac{1}{2}}$  részleges apasági együttható beírásával így a következő alakra redukálódik:

$$\mathcal{T}_{p\bar{n}} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2T_0}} \sum_{i=2Z+1}^A \langle \chi_n^{(-)} \varphi_i^{T_0, T_0-1} | v_1 | \varphi_i^{T_0 T_0} \chi_p^{(+)} \rangle. \quad (3.6)$$

Ez a képlet a kétrészecske-operátorok tulajdonságai miatt [Bo-69] egy kicserélődési taggal egészül ki, ha (1.5)-ben nem hanyagoljuk el a célmag részecskéi és a lövedék közötti antiszimmetriát:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{p\bar{n}} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2T_0}} \sum_{i=2Z+1}^A \langle \chi_n^{(-)}(2) \varphi_i^{T_0, T_0-1}(1) | v_1(1, 2) | (\varphi_i^{T_0 T_0}(1) \chi_p^{(+)}(2)) - \\ - | \chi_p^{(+)}(1) \varphi_i^{T_0 T_0}(2) \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (3.7)$$

(Egyidejűleg az optikai potenciálok nemlokálissá válnának, ettől azonban az optikai modell szellemében eljárvá megszabadulhatunk: a lokális potenciált energiánként illesztjük a rugalmas szóráshoz.) A direkt és a kicserélődési tag arányát a kétestest-erő koordináta-cserélő tagja módosítja. [Az így leírt kicserélődési hatást nevezik kiütési kicserélődésnek (knock-on exchange, [Sa-67b]).]

A T-mátrixelem kiszámításához a 2. §-ban mondottak szerint a  $\chi$ -ket parciális hullámokba kell dekomponálni, a kölcsönhatást pedig multipólus sorba kell fejteni. Ha feltesszük, hogy  $V(1, 2)$  azonos térbeli alakú lokális tagok összege, és sem sebes-



ségfüggő, sem tenzorérőt nem tartalmaz, azaz

$$V(1, 2) = v_0 + v'_1 \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2 = [v_{00} + v_{01} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + (v_{10} + v_{11} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2] f(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \quad (3.8)$$

$$\left( \vec{\sigma} = 2\vec{s}, \vec{\tau} = 2\vec{i}, v'_1 = \frac{1}{4} v_1 \right),$$

akkor  $v'_1$  multipólus sora

$$v'_1(1, 2) = 4\pi \sum_{LSJ} (-)^{S+J} v_{1S} f_L(r_1, r_2) \mathcal{Y}_{LSJ}(1) \cdot \mathcal{Y}_{LSJ}(2) \quad (3.9)$$

alakú [Gl-69], ahol

$$\mathcal{Y}_{LSJ} = [(i^L Y_L) \times \sigma_S]^{(J)} \quad (\sigma_0 = 1, \sigma_1 = \vec{\sigma}), \quad (3.10)$$

a  $[\times]$  és a  $\cdot$  jel pedig két tenzor tenzoriális, illetve skaláris szorzatát jelöli [Br-68b]. A (3.6) mátrixelem így az

$$\int u_{\bar{n}}^*(r_2) \left[ \int u_{i_i j_i}^{T_0, T_0-1}(r_1) f_L(r_1, r_2) u_{i_i j_i}^{T_0, T_0}(r_1) dr_1 \right] u_p(r_2) dr_2 \quad (3.11)$$

integrálok impulzusmomentum-csatolási együtthatókkal képezett lineáris kombinációjaként fejezhető ki, ahol az  $u(r)/r$  függvények a  $\varphi$ -knek és a  $\chi$ -k parciális hullámainak a radiális részei; a kicserélődési integrál pedig  $u_p$  és  $u_{i_i j_i}^{T_0, T_0}$  koordinátáinak egyszerű cseréjével áll elő.

A T-mátrix ilyen kifejtéséből a  $(p, \bar{n})$  átmenetek néhány általános sajátága leolvasható. A (3.6) közelítésben az átadott  $LSJ$  ( $S=0, 1$ ;  $|L-S| \leq J \leq L+S$ ) impulzusmomentumokra a

$$0 \leq J \leq 2I, \quad 0 \leq J \leq 2 \max \{j_i\}, \quad 0 \leq L \leq 2 \max \{l_i\}, \quad (3.12)$$

$$(-1)^L = 1 \quad (3.13)$$

megszorítások érvényesek ( $I$  a magspin), a kicserélődési tag ellenben (3.13)-nak nem engedelmeskedik. Ha az optikai potenciál spin—pálya kölcsönhatást nem tartalmaz, a differenciális hatáskeresztmetszetben az  $LSJ$  szerinti összegzés inkoherens. Mint (3.12)-ből látható, ha  $I=0$ , nincs impulzusmomentum-átadás, tehát  $V_{\bar{n}p}$  reprezentációja egy gömbszimmetrikus  $u_1$  potenciállal adekvát. Ha azonban a magspin nem nulla, a Lane-moddal a mikroszkopikushoz képest elhanyagolást tartalmaz.

Az inelasztikus és a töltéscserélő folyamatok analizisének általános tapasztalatai [Un-66, At-68, At-70] szerint a kicserélődési járulékok nem hanyagolhatóak el, sőt akár túl is szárnyalhatja a direktet. A kicserélődési amplitúdónak a  $(p, \bar{n})$  átmenet szempontjából három igen fontos tulajdonsága van. Először is, fázisa mint a szórás szög függvénye igen pontosan követi a direkt amplitúdóét, ezért a két tag konstruktívan interferál; ráadásul a kicserélődés a szögeloszlást csaknem érintetlenül hagyja, s ez arra utal, hogy hányadosuk közelítőleg független a szórás szögtől. Másodszor: a kicserélődési amplitúdó viszonylagos súlya erősen nő  $L$  növekedtével, és kicsi  $L=0$ -ra, tehát épp a páros-páros magokon előidézett  $(p, \bar{n})$  átmenetekben. Harmadszor: a (3.13) paritás szabályt sértő komponens kicsiny.

A  $V(0, i)$  effektív kölcsönhatás a 0 lövedék és a mag ütközését leíró Born-sor átrendezése és részleges összegzése révén úgy fogható fel, mint 0-nak és az  $i$ -edik

nukleonnak a többiek passzív csoportjától ( $c$  „törzs”) származó átlagos  $V(0, c)$  térben való többszörös ütközését leíró T-operátor [Do-75]:

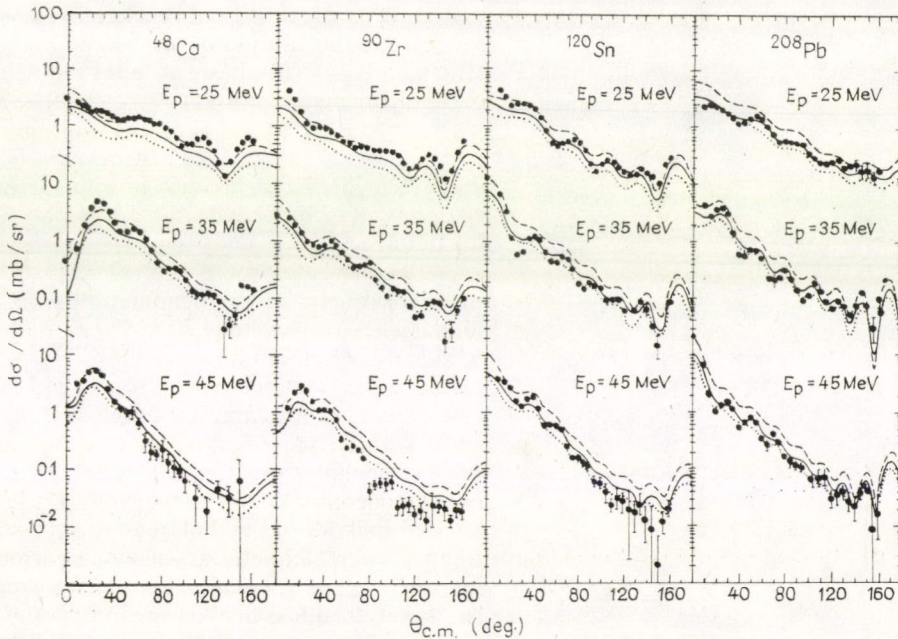
$$V(0, i) = V_{0i} + V_{0i} \frac{1}{E - H_0 - K_0 - V(0, c) + i\varepsilon} V(0, i), \quad (3.14)$$

ahol  $V_{0i}$  a csupasz nukleonok kölcsönhatása, és minden konkrét reprezentáció képzésekor  $\varepsilon \rightarrow +0$ . A DWBA-ban a  $\sum_i V(0, i)$  kölcsönhatás előidézte átmenetet

írjuk le, két csatolt csatorna esetében a közöttük mindkét irányban végbemenő összes ilyen átmenetet. Ám mindkét közelítésben elhanyagoljuk a kettőnél több nukleon bevonásával járó folyamatokat, amelyek közé nemcsak a közbenső mag képződése, hanem a féldirekt „törzspolarizációs” folyamatok is tartoznak.

A (3.14) egyenletből látszik, hogy  $V(0, i)$  voltaképp a pozitív energiára extrapolált G-mátrix, így kézenfekvő, hogy konkrét analízisekben a G-mátrixszal helyettesítsék. *Doering, Patterson és Galonsky* [Do-75] Reid lágymagvű kölcsönhatásából származtatott G-mátrixszal mint effektív erővel széles magtartományon jó egyezést kapott a kísérlettel (1. ábra). A pozitív energia miatt a  $V(0, c)$  átlagos kölcsönhatás komplex, így tulajdonképpen  $V(0, i)$  is komplex volna. Egy példa azt mutatja, hogy egy fenomenologikus képzetes tag javítja a G-mátrix szolgáltatta hatáskeresztmetszet és a kísérlet közötti egyezést [Lo-77].

Sokkal több munkában azonosították  $V(0, i)$ -t (3.8) típusú lokális fenomenologikus potenciállal [Sa-67b, Ba-68a, Ba-68b, An-69, Cl-69, Cl-70a, Co-72, Ri-73,



1. ábra. Mikroszkopikus ( $p, \bar{n}$ ) analízisek G-mátrix (folytonos) és  $\mu = 1$  fm hatótávolságú Yukawa kölcsönhatással ( $v_{10} = 12$  hosszú,  $v_{10} = 18$  MeV rövid szaggatott vonal) BG optikai potenciállal [Do-75]

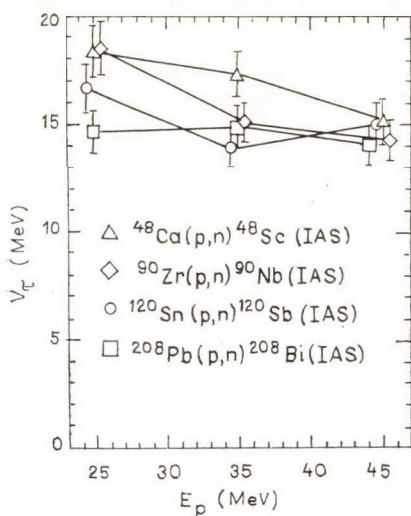


Ho-73a, Ho-74]. Az eredmény nem túl érzékeny sem az  $f(|\vec{r}_0 - \vec{r}_i|)$  alakjára, sem hatótávolságának pontos értékére, ha a potenciál erősségét illesztik; ezek leginkább a kicserélődési járuléknak a direkthez viszonyított arányában különböznek [At-70]. A realiztikus  $\mu = 1$  fm hatótávú

$$f(|\vec{r}_0 - \vec{r}_i|) = \mu \frac{e^{-\frac{|\vec{r}_0 - \vec{r}_i|}{\mu}}}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_i|} \quad (3.15)$$

Yukawa-féle alaktényező használata konvenció rangjára emelkedett [Au-72]. Az 1972 előtti kezdeti próbálkozások során nyert  $v_{10}$  erősségek a 15 MeV-es átlag körül elég erősen szórnak a nagyobb energiák és tömegszámok felé enyhén csökkenő értékekkel, a  $v_{11}$  paraméterek viszont — valószínűleg annak köszönhetően, hogy csak néhány alacsony tömegszámra vannak adatok — kis eltéréssel 12 MeV köré esnek [Au-72]. A  $v_{10}$  paraméterek nagy szórása valószínűleg az optikai paraméterek ad hoc megválasztásának tudható be [Do-75]. Egy imaginárius  $V_{\bar{n}p}$  tag bevétele jelentősen javít a kísérlet és az elmélet összhangján a fenomenologikus modellben is [Ho-73a, Ho-74].

Az  $^{40}\text{Ar}$ -tól  $^{90}\text{Zr}$ -ig nyolc magra végzett analíziseikben *Rickertsen*, *Kunz* és szerzőtársaik figyelembe vették a  $(p, d; d, \bar{n})$  kétlépcsős folyamatokat [Ri-73, Fi-74] is. Csatolt csatornás modelljükben a nukleon- és a deuteroncsatornák közötti csatolásban nulla hatótávot tételtek fel. Úgy találták, hogy a  $(p, d; d, \bar{n})$  folyamat önmagában ugyan mintegy tízszer gyengébb, mint a direkt  $(p, \bar{n})$  átmenet — egy kivétellel, ahol a két folyamat összemérhető [Fi-74] —, de hatása destruktív interferencia révén igen jelentékeny. Hogy ezt ellensúlyozzák, a  $v_{10}$  erősségeket 50–100%-kal növelni kellett. *Kunz* és *Charlton* azonban később rámutatott ezen analízis pontatlanságára [Ku-76]. Nulla hatótávú  $(p, d; d, \bar{n})$  számításokat egy modellben



2. ábra. Az előző ábrán látható kísérleteket legjobban illesztő fenomenologikus kölcsönhatások  $v_{10}$  erőssége [Do-75]

olyanokkal hasonlítottak össze, melyekben a  $p-n$  erő hatótávolsága véges volt, és úgy találták, hogy a hatáskeresztmetszet felére esett [Ku-76]. Ez arra utal, hogy az eredeti számítás [Ri-73] a kétlépcsős folyamat járulékát túlbecsülte.

*Doering*, *Patterson* és *Galonsky* a G-mátrixos analízist egy fenomenologikus illesztéssel is egybevetette ([Do-75] és 1. ábra). Mind a kísérleti, mind a G-mátrix szolgáltatott hatáskeresztmetszettel kitűnő alaki egyezést kaptak, és a 2. ábra tanúsága szerint  $v_{10}$  igen szabályosan viselkedik. A kontinuum-ba extrapolált G-mátrix a lövedék és a valencianukleonok között a nyugvó törzs jelenlétében működő teljes kölcsönhatást testesíti meg, így felöleli a valencianeutronok felcsípésével járó  $(p, d; d, \bar{n})$  mechanizmust is. A két erőtípussal nyert eredmények pontos egyezése arra utal, hogy a lokális fenomenologikus erő is képes ugyanazt a mechanizmust effektíve képviselni.



A mikroszkopikus szórás modell a kezdő és a végállapot megadásával akár mely direkt töltéscserélő (vagy inelasztikus) szórás átmenetre specializálható. A végállapotok rokonsága miatt a kváziasztikus szórás átmenetek mellett említendő az antianalóg állapotra (AAS) vezető  $(p, \bar{n})$  folyamat is.

Az AAS-nak nevezett modellállapot [Fr-62, La-62b] ugyanazon bázisállapotok ugyanolyan spinű és paritású állapotáá ugyanolyan relatív súllyal összekapcsolt kombinációja, mint az IAS, de izospinje eggyel kisebb:  $\Phi_{T_0-1, T_0-1}$ . Az alapállapot antianalogonjának konstruálását a Pauli-elv csak olyan magokban nem tiltja, amelyekben az egyszerű héjmodell-szkéma szerint a neutrontöbblet több héjra oszlik szét. Mivel az AAS azonos izospinű háttérállapotok között helyezkedik el, rendszerint felhasad, sőt, főleg nehéz magokban, szélesen szétterül. A nem nulla spinű AAS-okat az IAS  $\gamma$ -bomlása tünteti ki [Fo-74], az alapállapot antianalogonjait pedig pl.  $(d, \bar{n})$  [Vo-69, Fo-70b],  $(^3\text{He}, \bar{i})$  [Hi-70, Co-73a] és  $(p, \bar{n})$  reakciókkal is [No-70, Ga-73, Fi-74] gerjeszthetik.

Mint hogy a Lane-potenciál megőrzi a célmag izospinjét, a  $(p, \bar{n})$  átmenetről nem ad számot. Az alapállapot és az IAS koordinátatérbeli felcseréléssel szembeni szimmetriája azonos, ezért a különböző héjak járuléka a  $(p, \bar{n})$  átmenetben konstruktívan interferálnak. Az AAS az izospincsatolás szabályai és a Pauli-elv miatt ezekkel ellentétes tulajdonságú, így a héjak a  $(p, \bar{n})$  szórásban egymás hatását lerontják, és a folyamat a héjak hullámfüggvénye közötti különbségre érzékeny. E finom hatás miatt a  $(p, \bar{n})$  folyamatok leírása eddig csak kvalitatív sikert hozott [Ga-73, Fi-74]. A vizsgálatok tanúsága szerint a  $(p, d; d, \bar{n})$  mechanizmus relatív fontossága a  $(p, d; d, \bar{n})$ -ével összemérhető [Fi-74].

### 3. §. 3. Az aszimmetriatag meghatározása mikroszkopikus számításokkal

Az előző pontban a  $v_1$  nukleon—nukleon kölcsönhatási tagra koncentráltunk, de implicit módon  $U_1$ -ről is nyertünk ismereteket. A kiütési kicserélődési tag létezéséből arra következtethetünk, hogy  $U_1$  energiafüggő. A mikroszkopikus modellből kiindulva most azt fogjuk belátni, hogy  $U_1$  alakja szoros kapcsolatban van a mag neutrontöbbletének sűrűségével. Ehhez tekintsük a mikroszkopikus és a makroszkopikus elmélet közé hidat verő konvolúciós (folding) modellt [Gr-68].

A  $(p, \bar{n})$  szórás konvolúciós modelljéhez [Ba-69] úgy jutunk, ha (1.10)-ben a  $\Phi_{T_0 T_0}$  és a  $\Phi_{T_0, T_0-1}$  függvények térkoordináta- és spinfüggő részét ( $\Phi$ -vel jelölve) egyenlőnek vesszük, és az így nyert

$$u_j(r_0) \sim \int q_j(\vec{r}) v_j(|\vec{r} - \vec{r}_0|) d\vec{r} \quad (j = 0, 1) \quad (3.16)$$

képletben szereplő

$$q_j(\vec{r}) = \sum_{i=2jZ+1}^A \int \dots \int |\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{i-1}, \vec{r}, \vec{r}_{i+1}, \dots, \vec{r}_A)|^2 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_{i-1} d\vec{r}_{i+1} \dots d\vec{r}_A \quad (j = 0, 1) \quad (3.17)$$

kifejezést anyagsűrűségnek tekintjük. Így a mikroszkopikus modell olyan változatához jutottunk, mely elhanyagolja ugyan a kicserélődést, de a potenciálmátrix elemeit a Lane-modell értelmében konzisztensen határozza meg. Az összegzés határaiból következik, hogy  $q_0(\vec{r})$  a teljes anyagsűrűséget,  $q_1(\vec{r})$  pedig a fölös neutronok sűrűségét jelenti. A Lane-potenciál két tagja tehát a magerő egy-egy tagjának és



a neutron- és proton-sűrűség összegének, illetve különbségének konvolúciójával fejezhető ki:

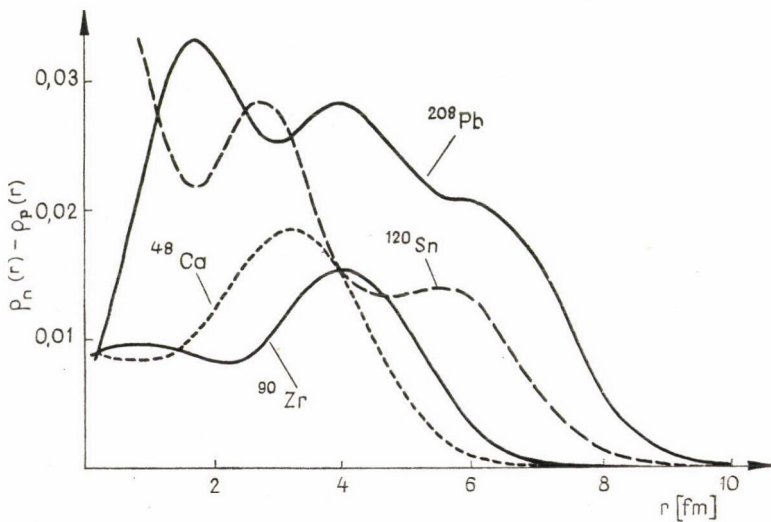
$$u_0(r_0) = \int [\varrho_n(\vec{r}) + \varrho_p(\vec{r})] v_0(|\vec{r} - \vec{r}_0|) d\vec{r}, \quad (3.18)$$

$$u_1(r_0) = \frac{1}{N-Z} \int [\varrho_n(\vec{r}) - \varrho_p(\vec{r})] v_1(|\vec{r} - \vec{r}_0|) d\vec{r}.$$

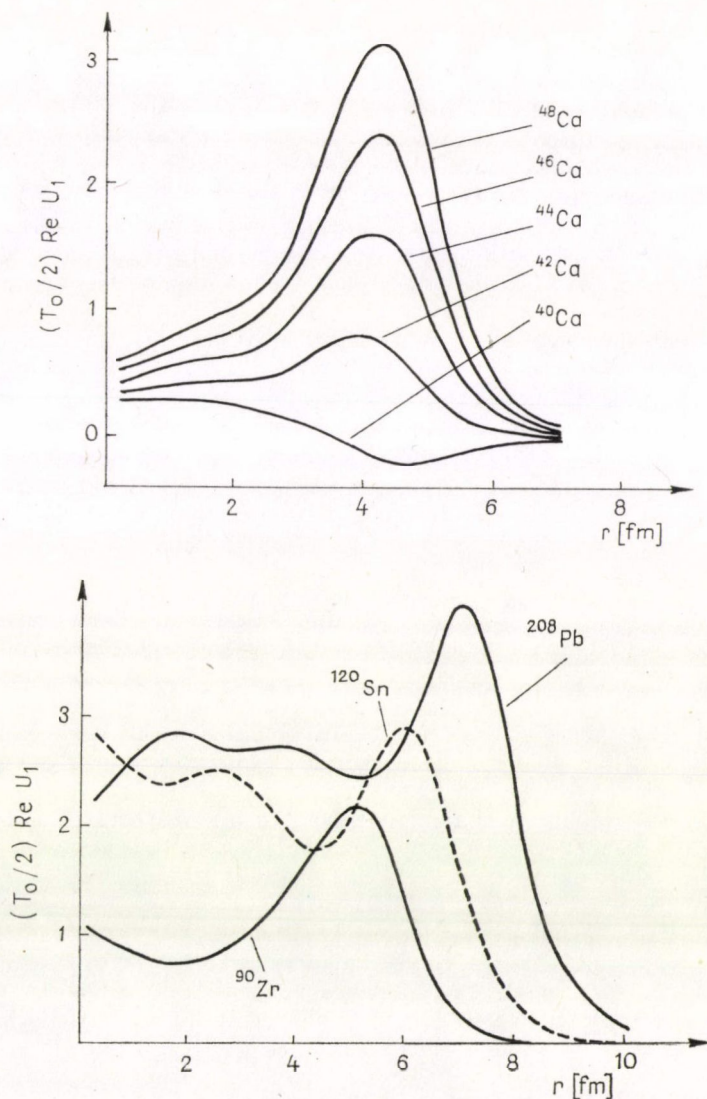
E képleteket, szigorúan véve, csak a potenciálok valós részére tekinthetjük érvényesnek. Ha ugyanis feltételeznénk, hogy a képzetes részeket is ugyanez a kapcsolat fűzi össze, mindenekelőtt az  $u_0$  tapasztalatból ismert tulajdonságaival kerülnék ellentétbe: ekkor tudniillik  $\text{Im } u_j(r)$  és  $\text{Re } u_j(r)$  alakjának igen hasonlóknak kellene lennie. (3.18) a teljes potenciálra csak azzal a módosítással tartható fenn, hogy  $\text{Im } V(1, 2)$  erősen sűrűségfüggő. Mivel e függést jelen pillanatig sem sikerült megbízhatóan megadni, a kísérletek interpretálásakor eddig a képzetes potenciáltagot a makroszkopikus szinten parametrizálták.

Az elvégzett analízisekben további közelítés az, hogy a diagonális potenciálokat némileg inkonzisztens módon közönséges optikai potenciálokkal helyettesítették [Ba-69, Sc-74a, Sc-76]. E munkák nézőpontjuk szerint két fajták: vagy a héjmodellel számított sűrűséggel reprodukálnak  $(p, \bar{n})$  szögeloszlásokat [Ba-69], vagy pedig a kvázielasztikus szórás analíziséből következtetnek a  $\varrho_p$  és a  $\varrho_n$  négyzetes átlagsugarának arányára [Sc-74a, Sc-76].

A (3.18) összefüggések — és antiszimmetrizált hullámfüggvényekre a lokális ekvivalens potenciál fogalma segítségével kiterjesztett általánosításai — lehetővé teszik, hogy a magszerkezeti számításokban bevált erőkkal a reakcióanalízisektől független számításokat végezhesse a makroszkopikus potenciálra. E számítások főként a potenciál térbeli alakjára irányadók. Ugyanis e számítások az alapállapot magszerkezet szempontjából realiztikusak, de más energiatartományban kipróbált



3. ábra



3. ábra. Néhány mag neutronfölöslegének  $\rho_n(r) - \rho_p(r)$  sűrűsége és a  $(T_0/2)u_1(r)$  aszimmetriatag  $E=0$  energián Hartree—Fok-közelítésben Skyrme-kölcsönhatás használatával [Do-72]

erőket használnak; az alak pedig főként a sűrűségtől, az erősség viszont inkább a nukleon—nukleon kölcsönhatástól függ. A  $\delta$ -erő egyszerű héjmodellben  $\text{Re } U_1(r)$ -et könnyű magokra ( $^{48}\text{Ca}$ ) felületi, nehezekre ( $^{132}\text{Sn}$ ,  $^{208}\text{Pb}$ ) térfogati típusúnak mutatja [Zi-68a]. A sűrűségfüggő erők és a Skyrme-kölcsönhatás Hartree—Fok-modellben minden magra egy térfogati plusz felületi típusú  $\text{Re } U_1(r)$ -et szolgáltatnak, de azt



a tendenciát, hogy a nehezebb magok felé haladva a térfogati tag súlya nő, érvényben hagyják (3. ábra, [Do-72, Né-73, Né-74]). E számítások azt mutatják, hogy  $U_1$  egy kicsiny spin—pálya tagot is tartalmaz [Do-72].

Mélyebb alapokig nyúlnak azok a szerzők, akik az optikai potenciált a szabad nukleonok között a nukleon—mag szórás energiáján ható kölcsönhatásra próbálják visszavezetni. Ezek előbb a maganyagon való nukleonszórás optikai potenciálját határozzák meg tagonként [Da-74, Je-76, Je-77a] mint az anyagsűrűség és az energia függvényét, majd ezt a lokálissűrűség-közelítésben, mely lényegében a (3.18)-at jelenti, fenomenologikus sűrűségeloszlásokat használva véges magokra alkalmazzák [Ha-75, Je-77a, Je-77b]. Jeukenne, Lejeune és Mahaux ilyen módon a teljes komplex optikai potenciált megadta a sűrűség függvényében parametrizálva [Je-77b]. Az ilyenfajta számítások inkább a potenciál teljes „tömegére” (pl. térfogati integráljára) adnak megbízható ismereteket, hiszen a felhasznált nukleon—nukleon erő pontosan erre a célra korrekt, a potenciál alakja viszont ki van téve a lokálissűrűség-közelítés hibáinak. Jeukenne és szerzőtársainak eredménye valamelyest alábecsüli az empirikusan talált izovektor potenciál térfogati integrálját mind a valós, mind a képzetes részre [Je-77b].

### 3. §. 4. Lane-modell-analízisek ( $p, \bar{n}$ ) szórásra

Az aszimmetriatagról a rugalmas szórásból szerzett tapasztalatainkat úgy összegezzük, hogy  $U_1$  komplex, valós és képzetes része is pozitív, képzetes része felületi típusú, és együttes hatásuk nagyjából egy  $V_{1V}=24$  MeV erősségű térfogati valós és fele olyan erős felületi képzetes tagénak felel meg. A mikroszkopikus számítások megtanítottak arra, hogy  $U_1$  egy nemlokális potenciál lokális ekvivalense (ennek diszkusszióját lásd [Sa-73b]-ben), tehát energiafüggő, valós része a neutrontöbblet sűrűségének alakját követi, és spin—pálya tagot tartalmaz. Ugyanígyennek mutatják-e  $U_1$ -et az erre legautentikusabb Lane-modellbeli ( $p, \bar{n}$ ) analízisek is?

A sok kísérleti adat egyedi illesztése meglehetősen tarka képet mutat. Változatos alakú valós [Sa-64a, Th-68, Mo-72, Wo-72b, Jo-73] és komplex [Ba-68a, Ba-68b, Wo-72a, Wo-72b, Wo-72c, Mo-72, Ho-72a, Wo-73, Jo-73, Ho-73b, Co-73b, Sc-74b, Ca-75, Gr-75, Pa-76] aszimmetriapotenciálok váltak be a ( $p, \bar{n}$ ) folyamat leírására, sokszor egyik vagy másik javára döntő evidencia nélkül [Wo-72b, Jo-73]. Az eredmények azonban kirajzolnak egy általános tendenciát. Megállapíthatjuk, hogy a valós átmeneti potenciáltag akkor ad jobb leírást, ha a magfelületen csúcsos [Sa-64a, Th-68, Jo-73], a tisztán valóssal szemben pedig egy felületi képzetes részt tartalmazó potenciál főlényben van [Ba-68a, Ba-68b]. Bár egy eset komplex  $U_1$ -ben is a felületi valós részt látszik kitüntetni [Ba-68a], az analízisek túlnyomó többsége a protonszórásban gyökerező hagyományok alapján (3. §. 1) a térfogati valós és a felületi képzetes rész kombinációját fogadja el.

Az analízisek az  $U_1$  energiafüggésére is rámutattak. 20—100 MeV közötti energián az  $U_1$  erőssége — különösen az  $\text{Im } U_1$ -é [Ba-68b, Pa-76] — csökkenő irányzatú [Th-68, Wo-72a, Ho-72a, Wo-72c, Jo-73]. Egy ilyen lassú tendencia nem mond ellent a kiütési kicserélődésről alkotott fogalmainknak. 20—25 MeV alatt azonban egy rezonanciaszerű energiafüggés is kimutatható [Ho-72a, Wo-72c, Wo-73, Gr-75]. Ezen adatok egy része [Mi-71, Ho-72a, Wo-72c] a rezonáns IAS (IAR) protonbomlásának megfigyelésén és azon a feltevésen alapszik, hogy ez külön-



választható egyéb (pl. a gerjesztett IAS-okból származó) protoncsoportoktól, továbbá az IAR protonbomlásának valószínűsége nem függ a bombázó energiától. Mivel az előbbi feltevés érvénye kérdéses [Gr-73a], ezen eredményekhez némi kétség fér. A  $^{51}\text{V}$ -re [Wo-73] és a Mo-izotópok egész sorozatára [Gr-75] azonban bizonyítottan tekinthető a rezonanciaszerű energiafüggés. Bár a közbenső rendszer multipólus óriásrezonanciáin keresztül végbemenő féldirekt folyamat jelenléte  $(p, \bar{n})$  reakcióban ki van mutatva [Am-74], valószínűtlen, hogy ez ilyen pregnáns effektust okozhasson [Gr-75]. Eddig e jelenségre nem sikerült kielégítő magyarázatot találni [La-77].

A  $(p, \bar{n})$  reakcióból meghatározott  $U_1$  a BG-potenciál adta értéket megközelelti, de többnyire alatta marad. Azonos energián széles magtartományt tekintve úgy találjuk, hogy mérsékelten ingadozik. A molibdénium izotópláncán azonban  $U_1$  viharos oszcillációjára bukkantak [Gr-75]. Ez a két tapasztalat a  $(p, p)$  szórásból kivont aszimmetriatag viselkedését idézi emlékezetünkbe (3. §. 1.). Az  $U_1$  gyors ingadozására az  $I^\pi = 2^+$ -os kollektív állapoton át lezajló  $0^+ \rightarrow 2^+ \rightarrow 2^+(\text{IAS}) \rightarrow 0^+(\text{IAS})$  szkémájú háromlépéses folyamat jelentős járuléka és tömegszámfüggése szolgáltatott magyarázatot [Ma-76]. Az ilyen típusú többlépcsős folyamat domináns a gerjesztett állapotok analógjaira vivő ún. kváziinelasztikus átmenetekben [Ma-72a, Wo-75a, Wo-75b], és általában hozzájárul a kvázielasztikus átmenethez is: destruktív interferencia révén 20–30%-kal csökkenti a hatáskeresztmetszetet, de a szögeloszlást nem befolyásolja [Ca-75]. Így a Lane-modelles számítások e folyamatot  $U_1$  illesztésével szimulálják. A BG-potenciál  $U_1$  tagjában benne levő geometriai  $(N-Z)/A$ -függés mellett ez okozhatja, hogy a  $(p, \bar{n})$ -ből származó  $U_1$  szisztematikusan kisebb az előbbinél.

A  $(p, \bar{n})$  folyamat differenciális analízálóképességének (analyzing power) mérése azt mutatja, hogy  $U_1$  valóban tartalmaz spin—pálya kölcsönhatást [Mo-72]. Ez azonban, bár nagyobb, mint amit a magszerkezeti számítás jósolt [Do-72], próbaszámításaink szerint túl gyenge ahhoz, hogy hatáskeresztmetszet-mérésekben is észrevétesse magát.

Mint látjuk, a kísérletekből kivont izovektor optikai potenciál zavarba ejtően gazdag jelenségeket sejtet. Minthogy azonban sok analízis tartalmaz önkényes, a Lane-modell szellemével ellenkező momentumokat, lehetséges, hogy a szeszélyes eredmények egy része ezeknek tulajdonítható. Erre utal, hogy a legkevesebb önkényt tartalmazó és a Lane-moddal teljesen konzisztens két analízissorozat, *Carlson, Lind, Zafiratos és szerzőtársainak* (CLZ) eredményei [Ca-73, Sc-74b, Ca-75], valamint *Patterson, Doering és Galonsky* (PDG) számításai [Pa-76] fednek föl legkevesebb szabálytalanságot a nagy tömegű adat ellenére.

A legtöbb önkényre a diagonális optikai potenciálok megválasztása adja az okot. Márpedig több szerző rámutatott, hogy a  $(p, \bar{n})$  hatáskeresztmetszet nagyon függ az optikai potenciáloktól, pl. az  $\text{Im } u_{\bar{n}}$ -nel fordítottan arányos [Sa-69, Wo-72b, Ho-73b, Ku-74]. A DWBA-technika sok szerzőt arra csábít, hogy a diagonális potenciálokat rögzítse — legtöbbször a globális BG-potenciálokhöz — és a DWBA-beli „formafaktort”, vagyis  $V_{np}$ -t ezektől függetlenül illesse az adatokhoz [pl. Wo-72a, Wo-72b, Mo-72]. Ez a teljes izospin megmaradásának megsértését jelenti, ezért nyilvánvaló eltérés a Lane-modelleltől, s mivel a BG-neutronpotenciál nem mindig megbízható, főként  $u_{\bar{n}}$  megválasztására kritikus.

Konzisztens Lane-potenciál keresésére elvben a *Cotanch és Robson* javasolta módszer a legalkalmasabb, mert e szerint egy izospinmegőrző függvényalak paramétereit mindhárom folyamathoz lehet illeszteni [Co-73b]. Ők  $u_p$ ,  $u_{\bar{n}}$  és  $V_{np}$  vagy



az  $u_0, u_1$  tagok helyett a teljes rendszer meghatározott  $T_{\geq} = T_0 \pm \frac{1}{2}$  izospinű állapotaihoz tartozó csatornáknakban érvényes  $u_{\geq}$  potenciálok illesztését javasolják. Mivel a  $t+n$  rendszer ( $t$  a célmag) izospinje éppen  $T_{\geq}$ , ezért  $u_{\geq} = u_n$ . Az  $u_{\leq}$  is könnyen kifejezhető, hiszen a  $T_{\leq}$  izospinű állapot  $\Phi_{T_0 T_0} \pi(2)$  és  $\Phi_{T_0, T_0-1} \nu(2)$  izospintérbeli Clebsch—Gordan-együtthatókkal képezett lineáris kombinációja. Ezek együtt az

$$\begin{aligned} u_{\geq} &= u_0 + \frac{T_0}{2} u_1 (= u_n) \\ u_{\leq} &= u_0 - \frac{T_0 - 1}{2} u_1 \end{aligned} \quad (3.19)$$

egyenletekben foglalhatók össze, amelyekből invertálás után  $u_{\geq}$  a Lane-egyenletekbe behelyettesíthető. A recept az, hogy  $u_{\geq}$ -at  $E_p - \Delta E_C$  energiájú neutron-szórásból kell meghatározni, majd  $u_{\geq}$  rögzítésével  $u_{\leq}$ -et a  $(p, p)$  és a  $(p, \bar{n})$  adatokhoz kell illeszteni. Kár, hogy  $E_p$ -nek megfelelő energiájú pontos  $(n, n)$  mérésekre is szükség van, mert kevésbé valószínű, hogy ez a többiekkel egyszerre hozzáférhető legyen.

Hoffmann szerint [Ho-73b, Ho-74, Ku-74] elegendő  $u_p$  és  $u_n$  pontos egyedi illesztése, s a Lane-modell igaz volta garancia arra, hogy ezekből [vö. (1.15)]

$$u_1(r) = T_0^{-1} \{ [u_n(r) - u_p(r)] - [u_0(E_n, r) - u_0(E_p, r)] \} \quad (3.20)$$

szerint  $u_1$ -et megkapjuk. Hangsúlyozza, hogy pontos  $u_1$ -et csak egyedi illesztéssel lehet kapni, és nem köti ki, hogy a protonparaméterek közül bármelyik is (pl. egy geometriai paraméter) egyenlő legyen a megfelelő neutronparaméterrel. A bemutatott néhány példában a (3.20) szerint nyert  $u_1$  a  $(p, \bar{n})$  kísérletet valóban jól reprodukálja.

CLZ [Ca-73, Sc-74b, Ca-75], valamint PDG [Pa-76] az előbbihez képest két szempontból is különböző oldalról közelíti meg a problémát: a  $(p, p)$  és a  $(p, \bar{n})$  folyamat együttes reprodukálásától remélik a Lane-potenciál meghatározását, még hozzá úgy, hogy a protonszórásban megelégszenek az átlagos BG-potenciál pontosságával, a  $(p, \bar{n})$ -t pedig erősen korlátozott paraméterkeresési eljárásnak vetik alá.

CLZ az  $u_p$ -t, a  $\text{Re } U_1$  alakját és a  $W_{1D}/V_{1V} = \frac{1}{2}$  arányt BG szerint rögzíti, és csupán  $V_{1V}$ -t,  $r_{1D}$ -t és  $a_{1D}$ -t variálja, miközben a neutronpotenciált a Lane-modell

$$u_n(r) = u_p(r) + T_0 u_1(r) + [u_0(E_n, r) - u_0(E_p, r)] \quad (3.21)$$

kikötése szerint változtatja. A  $\Delta$  Coulomb-korrekció  $u_n$ -ból értelemszerűen ki marad, a két csatorna közti energiakülönbséget pedig a BG protonpotenciál energiafüggésével veszik figyelembe. Így a csaknem a teljes tömegszám tartományon  $E_p = 22,8$  MeV energián végrehajtott igen pontos  $(p, \bar{n})$  méréseiket mérsékeltén magfüggő paraméterekkel jól sikerült illeszteniük (4. ábra), és az így generált Lane-potenciállal — a legnehezebb magok kivételével [Sc-74b] — számos hozzáférhető

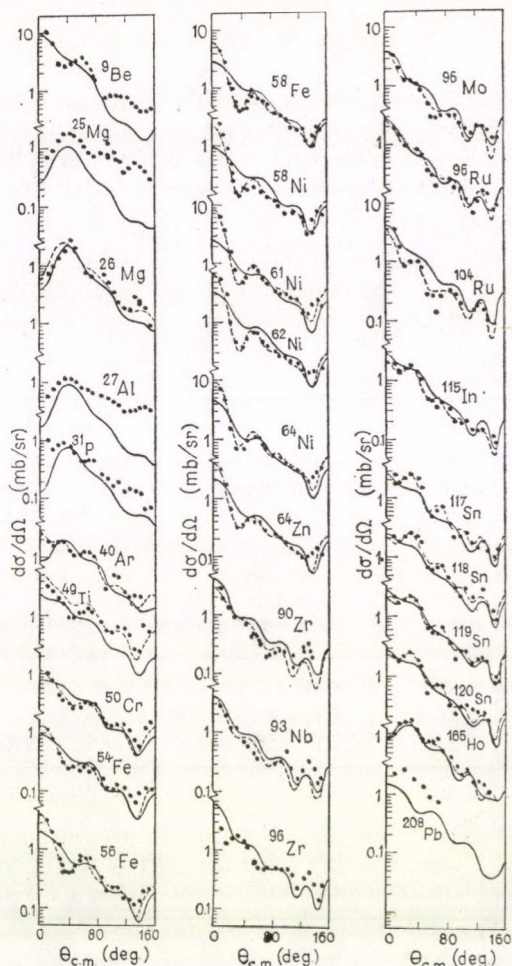


$(n, n)$  mérést sikerült kitűnően reprodukálniuk.

Patterson és munkatársai 25, 35 és 45 MeV-es bombázó nyalábbal mért  $(p, \bar{n})$  hatáskeresztmetszeteik [Do-75] illesztésére vállalkoztak, azaz a céllal, hogy energiafüggő globális Lane-potenciált alkossanak. Eljárásuk az, hogy  $U_1$  térbeli alakját a BG-féle  $u_0$ -éhoz rögzítik, és a lineárisan energiafüggőnek feltételezett  $V_{1V}$  és  $W_{1D}$  paramétereit az  $u_0$ -al együtt úgy változtatják, hogy  $u_p$  mindig a BG-féle protonpotenciállal maradjon egyenlő. Ezzel a módszerrel a mért adatokhoz egyszerre illesztenek. Az így nyert Lane-potenciál mind egyéb  $(p, \bar{n})$  adatok, mind  $(n, n)$  hatáskeresztmetszetek leírásában jól bevált.

E két utóbbi eredmény a Lane-modell eddigi legnagyobb sikere. Érdekes azonban konklúziójukat a nagyszámú egyéb eredmény fényében továbbgondolni. Pl. módszerük hogyan viszonylik Hoffmannéhoz? Alapos egyedi paraméteradajustálással nem lehetne-e a  $(p, p)$ , a  $(p, \bar{n})$  és az  $(n, n)$  folyamatok konzisztens leírását tovább pontosítani? Más szóval, nem célravezetőbb-e a Lane-modellben az optikai modellnek az a koncepciója, amely az egyedi paraméterek minden határon túli pontosítását tűzi ki céljául? Akár igen, akár nem, mi a jelentése az egyedileg illesztett paraméterek magról magra való fluktuációjának? Mi felel meg ezeknek mikroszkopikus szinten?

Ezzel kapcsolatban tisztáznunk kell álláspontunkat a mikroszkopikus és a makroszkopikus megközelítés viszonyáról. A mikroszkopikus módszer, mint láttuk, sok tekintetben mélyebb bepillantást nyújt a  $(p, \bar{n})$  folyamat természetébe, kivált az egyes átmenetek részleteibe, ami azonban nem jelenti, hogy teljesen helyettesítheti a Lane-modellt. A mikroszkopikus szórási modell sikere ugyanis nagyrészt azon további modellfeltevések helyességén és egyszerűségén múlik, amelyeket a mag hullámfüggvényeire és az effektív kölcsönhatásra kell tennünk, s amelyek direkt



4. ábra. Az  $E_p = 22,8$  MeV energián mért  $(p, \bar{n})$  differenciális hatáskeresztmetszetek a BG-potenciál (folytonos vonal) és a CLZ-illesztés (szaggatott vonal) eredményeivel összehasonlítva [Ca-75]



ellenőrzése gyakran meghaladná jelenlegi tudásunkat. A Lane-modell erőssége a mikroszkopikussal szemben egyszerűsége és heurisztikus ereje; ezért általánosítható könnyen a közönséges rugalmatlan szórás optikai modellje [Bu-63] alapján kváziinelasztikus átmenetekre, és ezért használható fel részecskeátadó reakciókban fellépő izospinhatások [Sc-69a] vizsgálatára is. Mindkét leírásmódnak megvan tehát a maga funkciója, de a jelenségek megértéséhez nagyban hozzájárul, ha tisztázzuk a kettő kapcsolatát. A további fejezetekben e célt fogjuk szem előtt tartani.

### III. ÁTLAGOS ÉS FLUKTUÁLÓ LANE-POTENCIÁL

#### 4. §. A Lane-modell konzisztenciája

A 3. §. 4. pontjában a  $(p, \bar{n})$  hatáskeresztmetszetnek az optikai potenciálra való érzékenysége hivatkozva hangsúlyoztuk, milyen fontos a Lane-modell értelmében konzisztens, vagyis a  $(p, p)$ ,  $(n, n)$  és a  $(p, \bar{n})$  eredményeket egyszerre reprodukáló és egyúttal izospinmegőrző paraméterek használata. Arra nézve, hogy tudunk-e egyáltalán ilyen paramétereket találni, s ha igen, milyen módszer célravezető, az ismertetett eredmények nem adnak egyértelmű választ.

Hoffmann rugalmas proton- és neutronszóráson alapuló módszerének fontos működési feltétele a paraméterek minden egyedi esetre való gondos illesztése. Az pedig, hogy a sok mag átlagos viselkedését képviselő BG-potenciál izospinsértő, egyenesen a konzisztens átlagos Lane-potenciál létezése ellen szól.

CLZ [Ca-75] és PDG [Pa-76] ezzel szemben átlagos jegyeket viselő Lane-potenciál  $(p, \bar{n})$  illesztéssel való keresésére dolgozott ki eljárásokat. Potenciáljukba átlagos viselkedést visz be, hogy a protonpotenciált mindkét csoport BG-től veszi át. Az aszimmetriát átlagos jellegét PDG munkájában az teremtetette meg, hogy a szerzők a sok  $(p, \bar{n})$  méréshez egyszerre illesztettek, a CLZ-eljárásban pedig az, hogy

a rugalmas szórási kísérletek általános tapasztalatát kifejező  $W_{1D}/V_{1V} = \frac{1}{2}$  megszorítást vezették be. Mindkét módszerrel számos esetben olyan Lane-potenciált sikerült találni, amely az  $(n, n)$  folyamatra is helyes, s ez az előző bekezdésben kifejtett érveknek ellentmond. A két álláspont összehangolására a közzétett eredmények alapján nincs mód.

E paradoxon feloldására törekedve most arra vállalkozunk, hogy megvizsgáljuk a  $(p, p)$ ,  $(p, \bar{n})$  és az  $(n, n)$  folyamat egyidejű Lane-modellbeli leírásának általános feltételeit. Hogy a Hoffman-módszer az átlagos BG-paraméterekkel nem működik, az a (3.1)-ből könnyen belátható. A két módszer viszonyának megvilágításához ezért csak két dolgot kell tisztázni: van-e jelentősége annak, hogy CLZ átlagos paramétereket használ, és fontos-e, melyik két folyamathoz illesztünk. Az első kérdés megválaszolására kipróbálunk egy olyan eljárást, amely ugyancsak illeszt  $(p, \bar{n})$ -hez, de egyidejűleg  $(p, p)$ -hez is, mégpedig igen alaposan. Ezt az individuális paraméterkereső módszer angol rövidítését használva ISM-ként emlegetjük. A kapott paraméterek konzisztenciáját úgy ellenőrizzük, hogy  $(n, n)$  szögeloszlásokkal hasonlítjuk össze. Hogy megállapítsuk, van-e jelentősége, melyik kettőhöz illesztünk a három folyamat közül, ugyanazokra az esetekre a fordított utat is végigjárjuk. Hoffman módszerével  $U_1$ -et konstruálunk, és alkalmazzuk a  $(p, \bar{n})$  szórásra. Vizsgálatainkhoz azokat a magokat szemeltük ki, amelyekre  $E_p = 22,8$  MeV környékén  $(p, p)$  mérések is vannak: a  $^{58}\text{Ni}$ -at és a  $^{64}\text{Zn}$ -et [Fu-62], a  $^{90}\text{Zr}$ -et és a  $^{96}\text{Zr}$ -ot [Ba-64].



4. §. 1. Lane-potenciál ( $p, p$ ) és ( $p, \bar{n}$ ) analízisből

A Lane-potenciálra az (1.17-19) függvényformát használjuk a

$$V_0 = V_0(E_p), \quad W_{0V} = W_{0V}(E_p), \quad W_{0D} = W_{0D}(E_p) \quad (4.1)$$

rövidítésekkel. BG-vel összhangban ezen paraméterek energiafüggését lineárisnak tételezzük fel:

$$V_0(E_n) = V_0 + \alpha(E_p - E_n) - 0,4 \frac{Z}{A^{\frac{1}{3}}}, \quad (4.2)$$

$$W_{0V}(E_n) = W_{0V} - \beta(E_p - E_n), \quad W_{0D}(E_n) = W_{0D} + \gamma(E_p - E_n),$$

és a

$$V_{s.o.} = 6,2, \quad r_{s.o.} = 1,01, \quad a_{s.o.} = 0,75, \quad r_C = 1,17, \quad \alpha = 0,32 \quad (4.3)$$

paramétereket rögzítjük. Az (1.13) Lane-egyenleteket egzaktul megoldottuk, hogy megkönnyítsük a  $p$ - és az  $\bar{n}$ -csatornabeli észlelési eredményekhez való egyidejű illesztést a potenciál izospinmegőrző tulajdonságának automatikus betartásával. A csatolt csatornás számítás előtt  $u_p$  meghatározására  $r_{0R}=1,17$ ,  $a_{0R}=0,75$ ,  $r_{0V}=r_{0D}$  rögzítésével egy közönséges optikaimodell-illesztést hajtottunk végre a proton-csatornában. Mivel az így kapott  $u_p(r)$  geometriailag igen hasonlított a BG-éhez, BG-energiafüggést tételeztünk fel. A csatolt csatornás analízisben  $U_1(r)$ -et a CLZ-féle  $U_1$  függvényből kiindulva variáltuk. A  $^{90}\text{Zr}$  esetében úgy találtuk, hogy ilyen indulás mellett  $V_{1D}$  és  $W_{1V}$  stabilan zérus körül ingadozik, ezért ezeket egyszer s mindenkorra 0-ban rögzítettük. Az  $U_1$  megmaradt paramétereit  $V_{1V}$ ,  $r_{1V}$ ,  $a_{1V}$ ,  $W_{1D}$  és  $W_{1D}$ ,  $r_{1D}$ ,  $a_{1D}$ ,  $V_{1V}$  csoportokban felváltva engedjük változni.

1. TÁBLÁZAT

Az egyidejű ( $p, p$ ) és ( $p, \bar{n}$ ) illesztésekből nyert Lane-potenciál paraméterei

Céltárgy	$V_0$	$r_{0R}$	$a_{0R}$	$W_{0V}$	$\beta$	$r_{0V}$	$a_{0V}$	$W_{0D}$	$\gamma$	$r_{0D}$	$a_{0D}$
$^{58}\text{Ni}$	51,36	1,17	0,75	1,87	0,22	1,323	0,65	4,89	0,25	1,323	0,65
$^{64}\text{Zn}$	50,80	1,17	0,75	4,00	0,22	1,291	0,67	3,84	0,25	1,291	0,67
$^{90}\text{Zr}$	51,04	1,174	0,74	1,57	0,03	1,455	0,82	5,27	-0,02	1,327	0,60
$^{96}\text{Zr}$	53,18	1,17	0,75	0,55	0,22	1,315	0,63	6,82	0,25	1,315	0,63

Céltárgy	$V_{1V}$	$r_{1V}$	$a_{1V}$	$\int \text{Re } U_1(r) d^3r$	$W_{1D}$	$r_{1D}$	$a_{1D}$	$\Delta E_C$
$^{58}\text{Ni}$	50,88	0,508	0,64	$3,3 \times 10^3$	11,23	1,308	0,87	9,55
$^{64}\text{Zn}$	39,26	0,666	1,19	$7,5 \times 10^3$	12,09	1,250	0,84	9,90
$^{90}\text{Zr}$	55,65	0,193	1,14	$7,8 \times 10^2$	12,43	1,160	0,94	12,03
$^{96}\text{Zr}$	6,28	0,847	1,06	$2,7 \times 10^3$	22,63	1,246	0,70	11,52

$$V_{s.o.} = 6,2, \quad r_{s.o.} = 1,01, \quad a_{s.o.} = 0,75, \quad r_C = 1,17, \quad \alpha = 0,32.$$

Az aláhúzott paraméterértékeket nem variáltuk.



A  $^{90}\text{Zr}$  esetében azonban a (4.3)-ban felsoroltakon kívül  $u(r)$  minden paraméterét változtattuk. Mivel így  $\text{Im } u_0(r)$  térbeli alakja tetemesen megváltozott, a  $\beta$  és a  $\gamma$  paraméternek ugyancsak új értéket kellett adnunk. Ezeket 16 MeV-es  $(p, p)$  adatok [Ma-72b] ugyanilyen geometriájú  $u_p$ -vel való illesztése útján nyertük. Az új  $\beta$ -t és  $\gamma$ -t ezután beírtuk a Lane-egyenletekbe, és az  $U_1$  paramétereit újra adjusztáltuk.

## 2. TÁBLÁZAT

Az egyidejű  $(p, p)$  és  $(p, \bar{n})$  illesztésekből nyert  $10^{-2}\chi^2$  értékek

Reakció	$(p, p)$		$(p, \bar{n})$		$(n, n)$			
	CLZ	ISM	CLZ	ISM	CLZ	ISM	$u_p(\text{ISM}) + \frac{4T_0}{A} \times U_1(\text{CLZ})$	Módosított ISM
$^{58}\text{Ni}$	3,8	0,8	5,6	1,5	2,0 <sup>a</sup> 0,69	4,5 <sup>a</sup> 1,2	4,8 <sup>a</sup> 1,3	2,9 <sup>a, b</sup> 0,94 <sup>b</sup>
$^{64}\text{Zn}$	3,4	1,6	8,2	1,9	4,0 <sup>a</sup>	5,3 <sup>a</sup>	5,6 <sup>a</sup>	3,7 <sup>a, c</sup>
$^{90}\text{Zr}$	1,5	1,5	5,0	0,72	1,7 <sup>a</sup>	18 <sup>a</sup>	3,8 <sup>a</sup>	2,1 <sup>a, d</sup>
$^{98}\text{Zr}$	1,8	1,9	18 <sup>e</sup>	1,3				

<sup>a)</sup> Egyetlen izotópra vonatkozó eredmények összehasonlítása izotóptáblagokon végzett mérésekkel

<sup>b)</sup>  $V_0^n = V_0^n(\text{ISM}) - 2 \text{ MeV}$ ,  $W_{0D}^n = W_{0D}^n(\text{ISM}) + 0,6 \text{ MeV}$ .

<sup>c)</sup>  $V_0^n = V_0^n(\text{ISM}) - 4 \text{ MeV}$ .

<sup>d)</sup>  $W_{0D}^n = W_{0D}^n(\text{ISM}) + 2 \text{ MeV}$ .

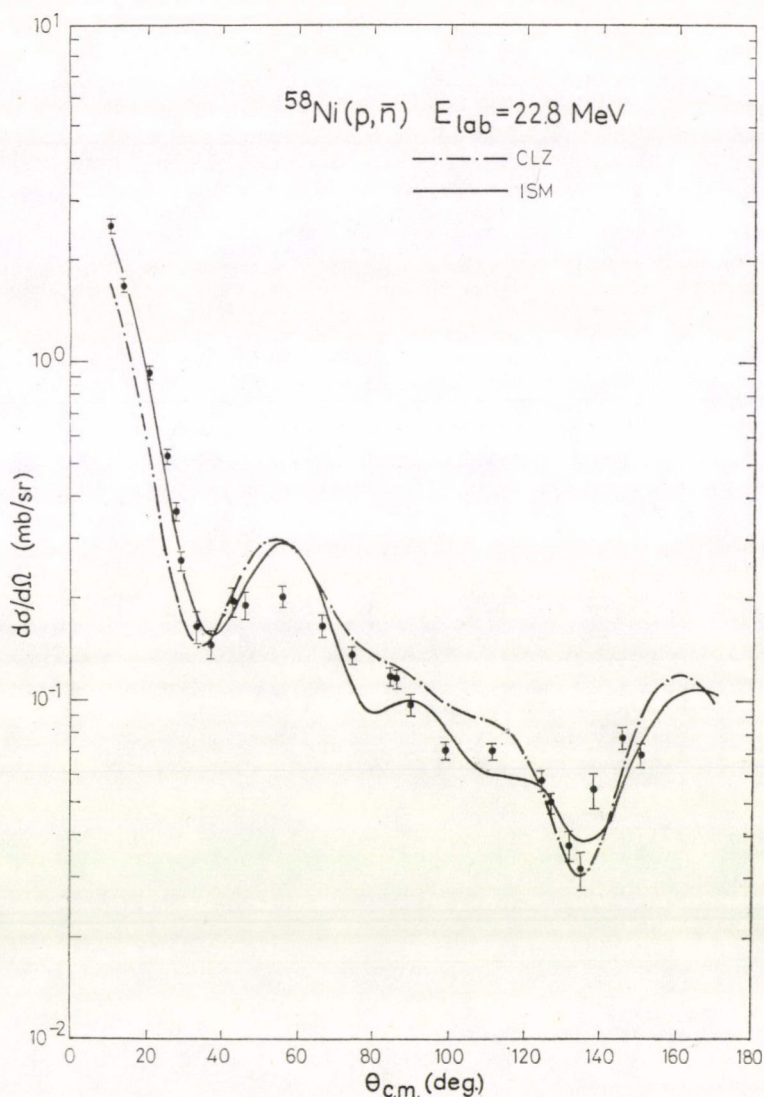
<sup>e)</sup> CLZ-illesztések híján interpolált  $U_1$ -gyel számolva.

A  $(p, p)$ -ben és  $(p, \bar{n})$ -ben szimultán végigvitt optimalizálással kapott paramétereket az 1. táblázatban adjuk meg. Az illesztések minőségét más paramétersorozatokéval a

$$\chi^2 = \sum_i [\sigma_{\text{exp}}(\vartheta_i) - \sigma_{\text{th}}(\vartheta_i)]^2 / [4\sigma_{\text{exp}}(\vartheta_i)]^2 \quad (4.4)$$

menynység segítségével a 2. táblázatban hasonlítjuk össze. Mivel a kísérleti hibák eltérően vannak definiálva az egyes mérésekben,  $\chi^2$  csak ugyanazon mérésekhez végzett különböző számítások simulálásának minőségét méri. Az  $(n, n)$  méréseket 14,1—14,7 MeV közötti energián [An-59, Ra-59, Cl-67, Tu-74] és egy kivétellel [Tu-74] természetes izotópkeverékeken végezték. A  $^{58}\text{Ni}$ -ra végzett különféle számításoknak tiszta  $^{58}\text{Ni}$ -on és Ni-keveréken végrehajtott mérésekkel történt  $\chi^2$ -es egybevetése azonban ugyanazt a tendenciát mutatja, így e pontatlanság miatt nem aggódunk. A mért és számított  $(p, \bar{n})$  és  $(n, n)$  keresztmetszeteket az 5—8. ábrán is összehasonlíthatjuk.

A  $(p, \bar{n})$  illesztéseket az ISM tekintélyesen meg tudta javítani a CLZ-módszerhez képest, ám az új paraméterek a régiek sima viselkedésével szemben magról magra szeszélyesen változnak. Ez a potenciál minden magnak olyan egyéni sajátja, hogy amelyik az egyikén kitűnő egyezést ad, az már a közeli magokon is csődöt mond. Az aszimmetriapotenciálok valós része különleges alakú, amelynek mikroszkopikusan aligha lehetne jelentést tulajdonítani. Igaz, a  $\text{Re } u_0$ -éval azonos alakú  $\text{Re } U_1$  használata is inkább csak a nem túl eltérő alakú potenciálok közelítő ekvi-

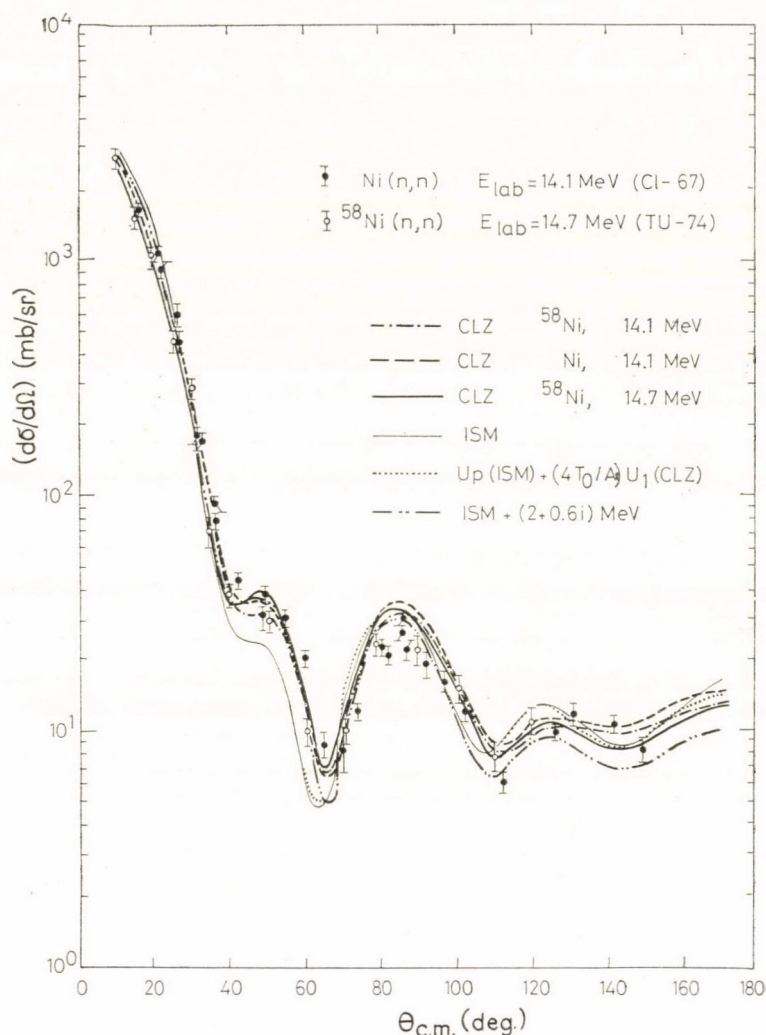


5. ábra

valenciájától [Sa-69] megengedett önkényesség, mintsem mikroszkopikusan meg-alapozott választás. A paraméterek viselkedésében talán az az egy szabályosság lel-hető fel, hogy az  $U_1$ -ben a valós rész súlya lecsökkent. (A CLZ-potenciálban az  $\int \text{Re } U_1(r) d^3\vec{r}$  mennyiség értéke  $^{58}\text{Ni}$ -ra  $7,7 \times 10^3$ ,  $^{64}\text{Zn}$ -re  $8,4 \times 10^3$ ,  $^{90}\text{Zr}$ -re  $1,3 \times 10^4$ ,  $^{96}\text{Zr}$ -ra pedig  $1,4 \times 10^4$ .)

Az  $(n, n)$  kísérlet ISM-illesztésének a minősége minden magra lényegesen rosszabb, mint amit a CLZ-módszer ad. Két egymás utáni  $(p, p)$ — $(p, n)$  paraméter-

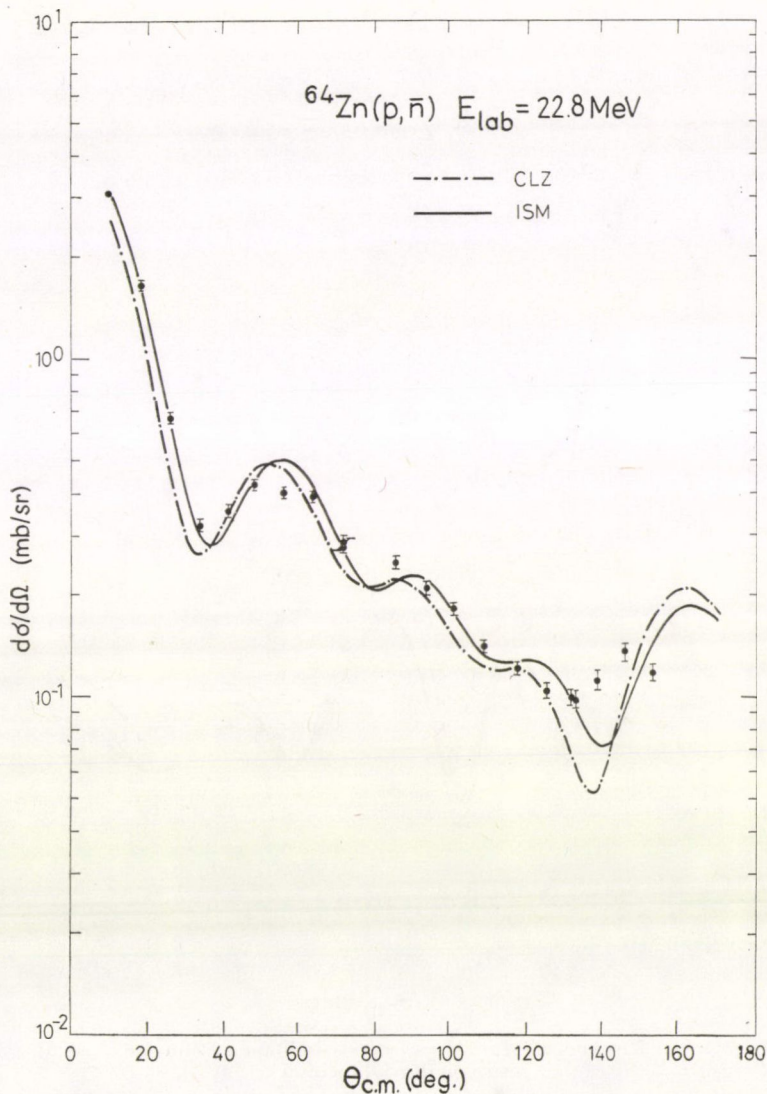




5. ábra. Lane-modell-számítások összehasonlítása a  $^{58}\text{Ni}$  ( $p, \bar{n}$ ) [Ca-75] és ( $n, n$ ) [CI-67, Tu-74] mérésekkel

kereső lépés szolgáltatatta  $u$  közül a korábbi ad jobb egyezést ( $n, n$ )-re, s ez arra utal, hogy minél jobb a ( $p, p$ ) és a ( $p, \bar{n}$ ) illesztése, annál rosszabb az ( $n, n$ )-é. Hasonló észrevételt tettek Patterson és szerzőtársai a mi közleményünk után kevéssel megjelent cikkükben [Pa-76]. Hogy megvizsgáljuk, melyik  $u_n$  tag felelős az egyezés elromlásáért, megismételtük az ( $n, n$ ) számításokat olyan  $u_n$ -nel, melyet (3.21) értelmében az ISM protonpotenciálja és a CLZ-féle  $U_1$  tag határoz meg. Ennek az eredményét az  $u_n = u_p(\text{ISM}) + (4T_0/A)U_1(\text{CLZ})$  megjelöléssel illetjük.

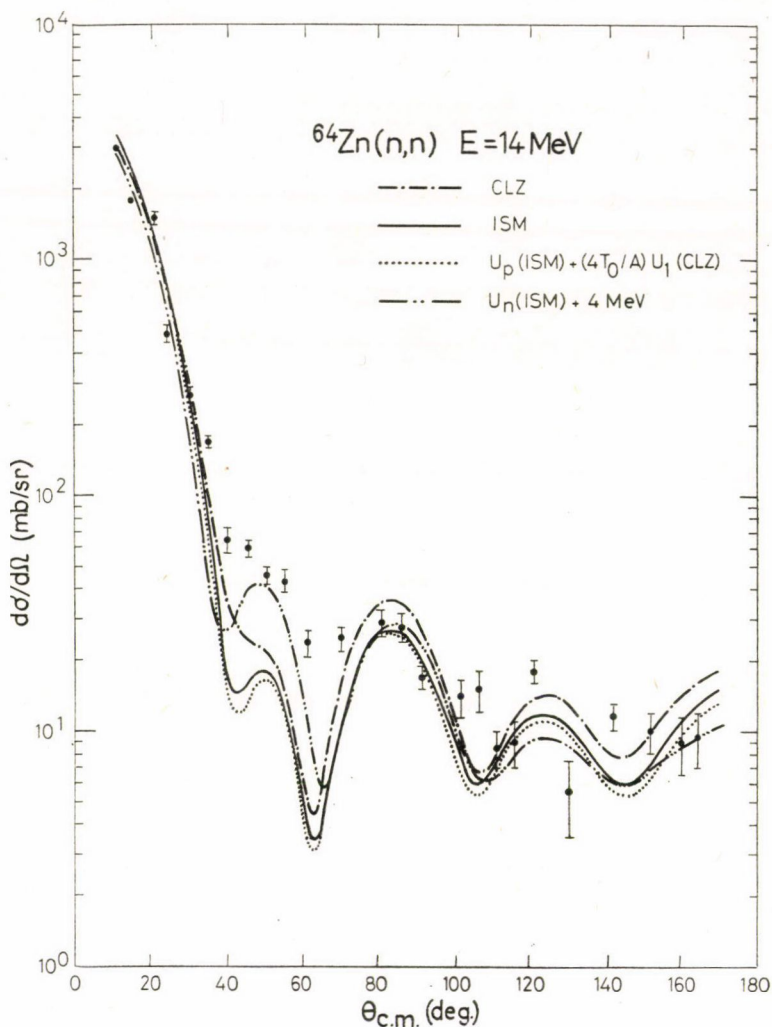
A  $^{58}\text{Ni}$  esetében ez a hatáskeresztmetszet az ISM-éhez igen hasonlít. Ez azt bizonyítja, hogy a CLZ-módszerben az ( $n, n$ ) adatokkal való jó egyezés a ( $p, p$ )



6. ábra

illesztés minőségének a rovására jön létre (2. táblázat). Valóban, az illesztett  $\text{Re } u_p$  mintegy 1,6 MeV-rel mélyebb, mint a BG-féle, és bár különböző geometriával, az illesztett  $\text{Im } u_p$  jelentősen sekélyebb, mint a BG-potenciál megfelelő tagja. Így az ISM és az  $(n, n)$  kísérlet közötti egyezés csak akkor javítható, ha a képzetes potenciált mélyítjük, a valós tagot pedig sekélyítjük („módosított ISM” a 2. táblázatban). Világos tehát, hogy ebben az esetben a neutronpotenciál nem az  $U_1$ , hanem az  $u_p$  tökéletességétől romlik el.

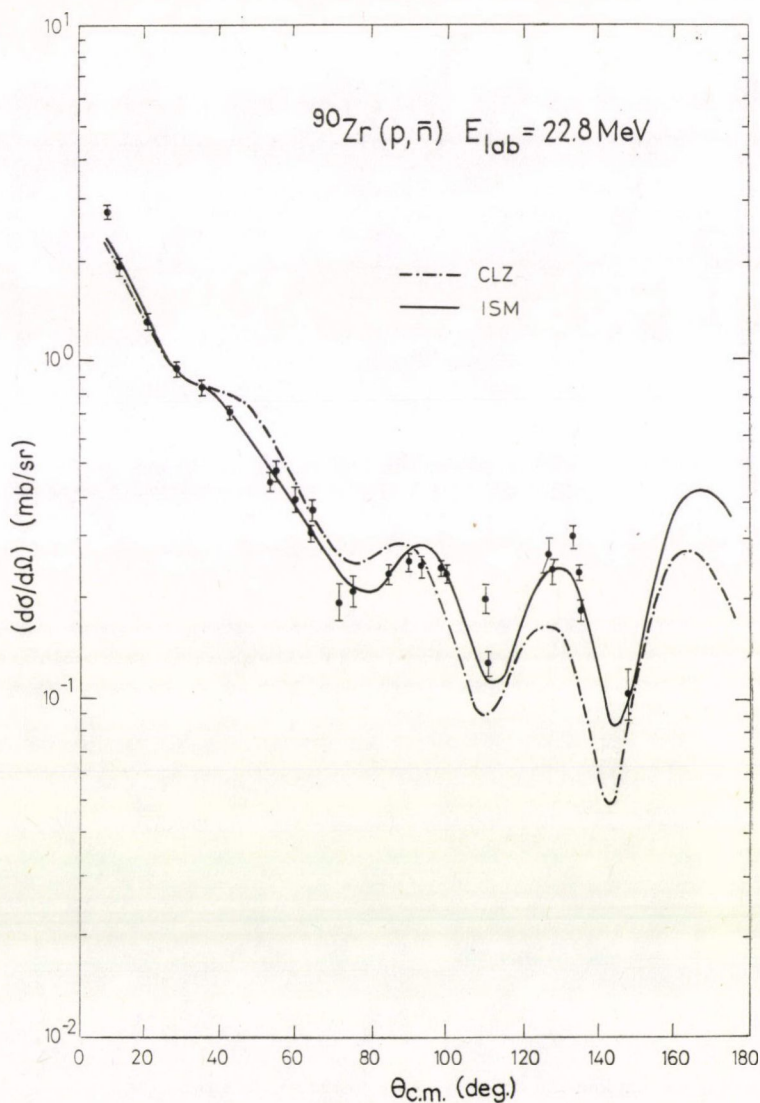




6. ábra. Lane-modell-számítások összehasonlítása a  $^{64}\text{Zn}(p, n)$  [Ca-75] és  $(n, n)$  [Ra-59] mérésekkel

A  $^{64}\text{Zn}(n, n)$  szórást az  $u_n = u_p(\text{ISM}) + (4T_0/A) U_1(\text{CLZ})$  potenciál még kevésbé adja vissza, mint  $u_n(\text{ISM})$ . A  $V_0$  az egyetlen paraméter, amelynek egyedüli megváltoztatásával a CLZ-módszerrel kapott  $\chi^2$  — de nem maga a szögeloszlás — visszaállítható. Az  $u_n(\text{ISM})$  gyarlósága ismét nem  $U_1$  különleges formájának, hanem az  $u_p$  túlzott tökélyének a rovására írandó.

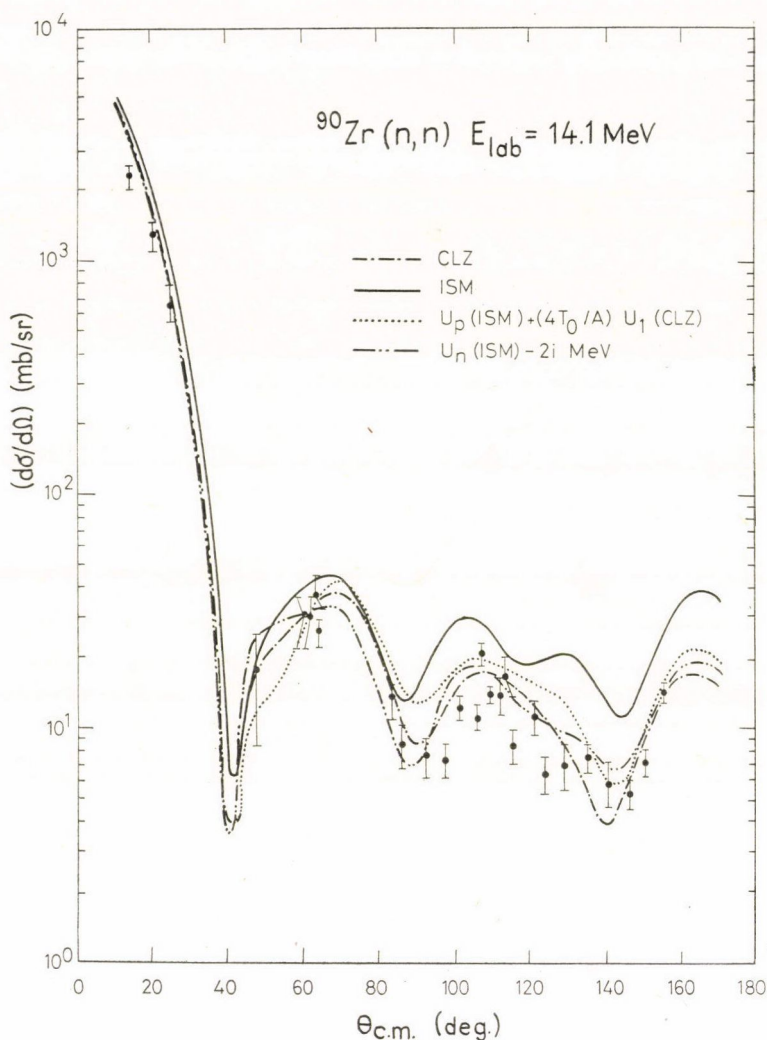
A  $^{90}\text{Zr}$ -re az  $u_n = u_p(\text{ISM}) + (4T_0/A) U_1(\text{CLZ})$  potenciállal végzett számítás közepes minőségű egyezést ad, mely az  $u_p(\text{ISM})$  és az  $u_p(\text{CLZ})$  közti kiáltó különbség ellenére inkább a CLZ-görbére emlékeztet. Ez azt implikálja, hogy az  $u_n(\text{ISM})$



7. ábra

kudarcát ezúttal az aszimmetriapotenciál okozza. Nevezetesen,  $u_1(\text{ISM})$  erős imaginárius tagja  $\text{Im } u_n(\text{ISM})$ -et túl sekélyté teszi. Valóban,  $|\text{Re } u_n(r)|$  térfogati integráljának csökkentése a CLZ-potenciáltagénak az értékére keveset számít, a felületi abszorpció 2 MeV-es erősítése viszont javít az egyezésen.

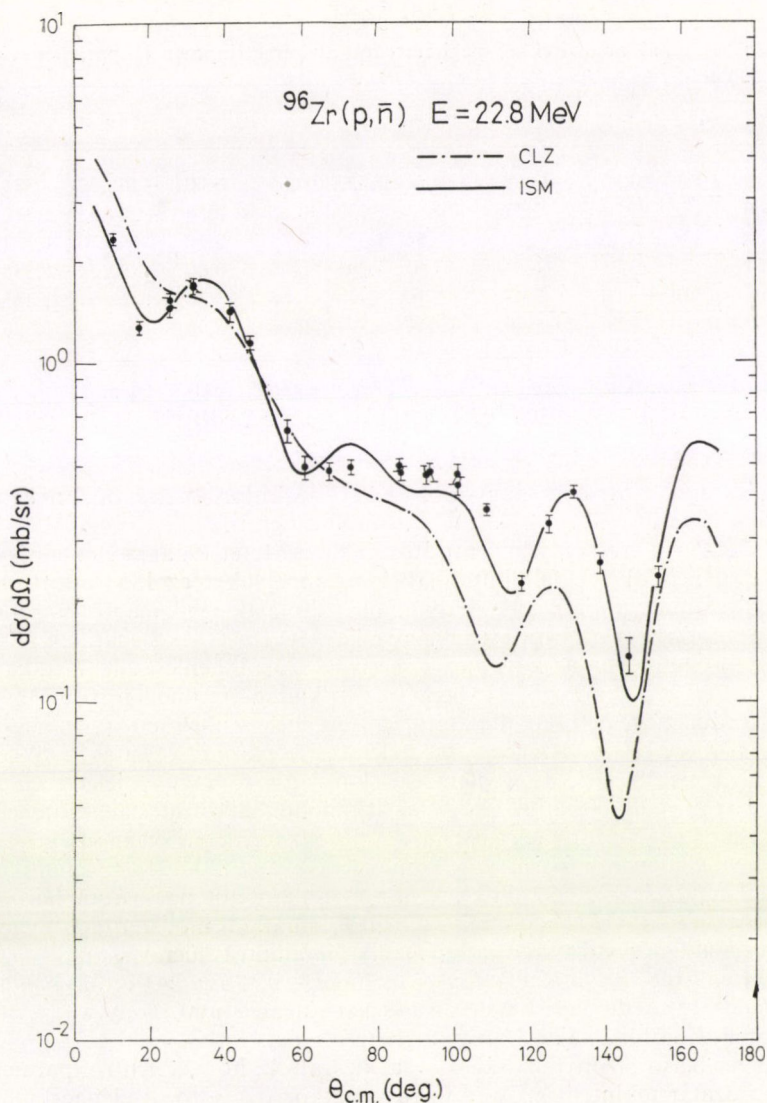




7. ábra. Lane-modell-számítások összehasonlítása a  $^{90}\text{Zr}(p, \bar{n})$  [Ca-75] és  $(n, n)$  [An-59, Cl-67] mérésekkel

#### 4. §. 2. Aszimmetriapotenciál rugalmas proton- és neutronszórásból

Az  $u_p(r)$  és az  $u_n(r)$  sugár- és energiafüggésének bizonytalanságát a különbségképzés  $[u_n(r) - u_p(r)]$ -ben felnagyítja, s ez kétséget ébreszt egy (3.20)-ra alapozott módszer használhatóságával szemben. Ebben a pontban rámutatunk a módszer bizonytalanságára, de azt is beláttatjuk, hogy lényegében ugyanarra a következtetésre vezet, mint a  $(p, p) - (p, \bar{n})$ -beli egyedi illesztések módszere.



8. ábra. Lane-modell számítások összehasonlítása a  $^{96}\text{Zr}(p, \bar{n})$  [Ca-75] mérésekkel

Olyan formájú optikai potenciálokat illesztettünk azelasztikus szórás adatokhoz, amelyekben nem volt szeparálva az aszimmetriatag. Az aszimmetriapotenciált (3.20) alapján határoztuk meg,  $u_p$  mélységére  $E_p$  és  $E_n$  között,  $u_{\bar{n}}$  mélységére pedig  $E_{\bar{n}}$  és  $E_n$  között BG-energiafüggést feltételezve. Az  $U_1$  paramétereit tartalmazó 3. táblázat jelölése (1.17)-hez alkalmazkodik. Mivel azonban a különböző



## 3. TÁBLÁZAT

A  $(p, p)$  és  $(n, n)$  analízisekből meghatározott aszimmetriapotenciál paraméterei

	$V_{1V}$	$r_{1V}$	$a_{1V}$	$W_{1V}^p$	$W_{1D}^p$	$r_{1V}^p = r_{1D}^p$	$a_{1V}^p = a_{1D}^p$	$W_{1V}^n$	$W_{1D}^n$	$r_{1V}^n = r_{1D}^n$	$a_{1V}^n = a_{1D}^n$
$^{58}\text{Ni}1$	40,72	1,17	0,75	-3,37	110,56	1,323	0,65	0,00	-146,32	1,331	0,47
$^{58}\text{Ni}2$	15,60	1,17	0,75	-3,37	110,56	1,323	0,65	-2,58	-264,58	1,380	0,29
$^{58}\text{Ni}3$	28,54	1,17	0,75	-3,37	110,56	1,323	0,65	0,00	-133,70	1,252	0,56
$^{64}\text{Zn}$	41,51	1,17	0,75	16,54	57,62	1,291	0,67	0,00	-82,52	1,355	0,45
$^{90}\text{Zr}1$	14,06	1,174	0,74	-1,49	43,19	1,314	0,66	-8,30	-28,01	1,355	0,51
$^{90}\text{Zr}2$	6,47	1,174	0,74	-1,49	43,19	1,314	0,66	-5,96	-34,39	1,306	0,50

Az aláhúzott adatokat rögzítettük vagy rögzített paraméterekből származtattuk.

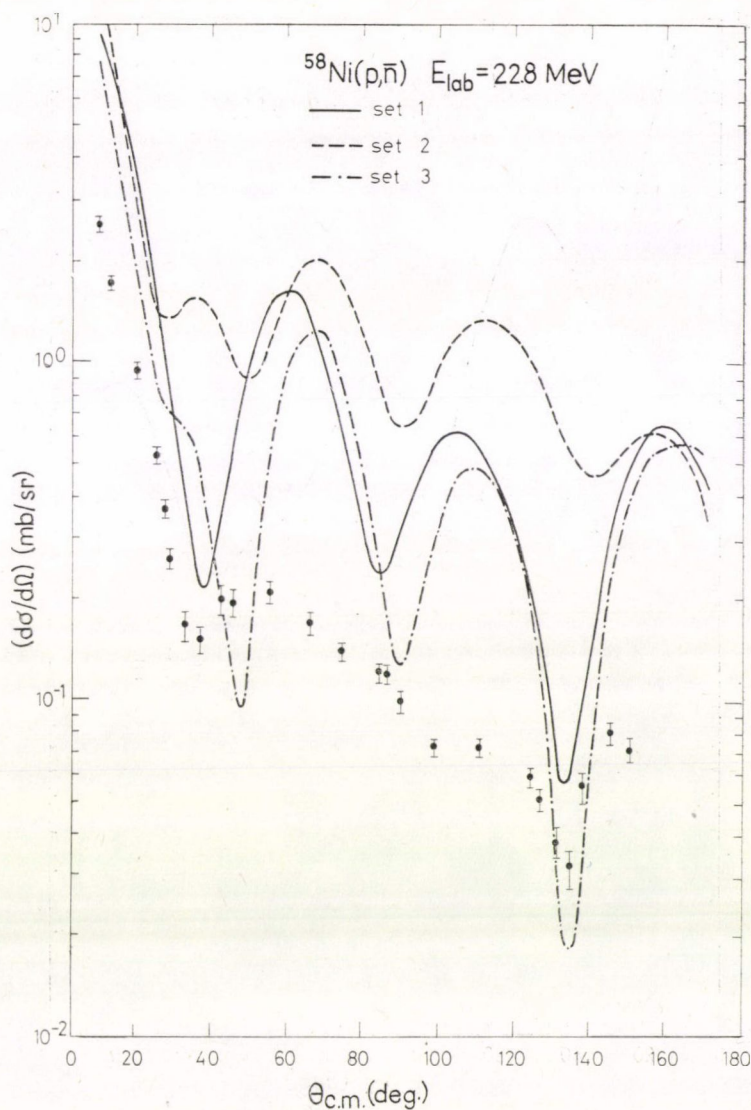
A  $p$  és  $n$  indexű paraméterek mind a képzetes részhez tartoznak és  $u_p$ -ból, ill.  $u_n$ -ből származnak.

alaktényezőjű tagok száma itt nagyobb, ezeket megkülönböztetendő, itt egy újabb indexet kellett bevezetnünk, mely a tag származását jelöli.

Az elmélet egyik esetben sem reprodukálja a kísérletet (9. ábra), és az így nyert aszimmetriapotenciálok még elfajultabbak, mint amelyeket az ISM adott. A valós tagok (és térfogati integráljaik is) szabálytalanul változnak egyik magról és paramétersorozatról a másikra. A  $^{58}\text{Ni}$ -ra és a  $^{64}\text{Zn}$ -re kapott  $\text{Im } U_1$ -ek negatívak. Ebből az előjelből (3.19) értelmében az következik, hogy az izospinben csatolt  $T_>$  állapotban az abszorpció nagyobb, mint a  $T_-$ -ben, s ez fizikailag értelmetlen [Co-73b]. Ez az előjel attól fordul meg, hogy az illesztett  $u_p$  kevésbé, az illesztett  $u_n$  pedig jobban abszorptív, mint CLZ-módszerbeli megfelelőik. Ugyanez a hatás csökkenti le  $\text{Im } U_1$ -et a  $^{90}\text{Zr}$  esetében is, de itt nem elég erős ahhoz, hogy előjelét megfordítsa.

Összegezve megállapíthatjuk, hogy az ily módon alkotott Lane-potenciál sem ellentmondásmentes. Mi több, egy párhuzam figyelhető meg a két módszerrel kapott potenciálok tökéletlensége között. A konzisztencia a (3.20—21) szematikus egyszerűsítésével úgy fejezhető ki, hogy a három folyamatot adekvátn leíró három potenciáltagra  $u_p - u_n + T_0 u_1 = 0$  teljesül. Ettől mindkét módszer eredménye úgy tér el, hogy ha a kiszámított tagot a harmadik folyamatot hüen visszaadó tagra cseréljük, az egyenlőség  $\text{Re } [u_p - u_n + T_0 u_1] < 0$ ,  $\text{Im } [u_p - u_n + T_0 u_1] > 0$  irányban tolódik el. A két módszer eredményének ez az összhangja arra utal, hogy a  $(p, \bar{n})$  és az  $(n, n)$  folyamat kombinációjától sem várhatunk mást.

A módszer belső bizonytalanságát azzal vizsgáltuk, hogy a neutronparamétereknek több sorozatát tekintettük. A  $^{58}\text{Ni}$ -ra vonatkozó 2. sorozat eléggé különbözik az 1.-től, de csak 5%-kal nagyobb  $\chi^2$  tartozik hozzá, mint az 1.-höz; a  $(p, \bar{n})$  görbék megdöbbszentően különböznek. Annak ellenére, hogy a  $^{90}\text{Zr}$  1. sorozata csak 6%-kal illeszti rosszabbul az  $(n, n)$  szórást, mint a 2., s még hozzá hasonlít is a 2.-ra,  $(p, \bar{n})$  szögeloszlásai meglehetősen eltérnek, ráadásul az 1. rugaszkodik kevésbé messze a kísérlettől. E példák bizonyítják, hogy a módszer bizonytalansága valóban nagy. Lehetséges persze, hogy a proton- és neutronpotenciálok egymásnak megfelelő paramétereire kirótt megszorítások jórészt kiküszöbölnék e bizonytalanságot, és esetleg kiderülhetne, hogy a Hoffmann-módszerre bemutatott példákban nyert alaki egyezés [Ho-73b, Ho-74, Ku-74] nem pusztán a véletlen műve. Egy meglehetősen

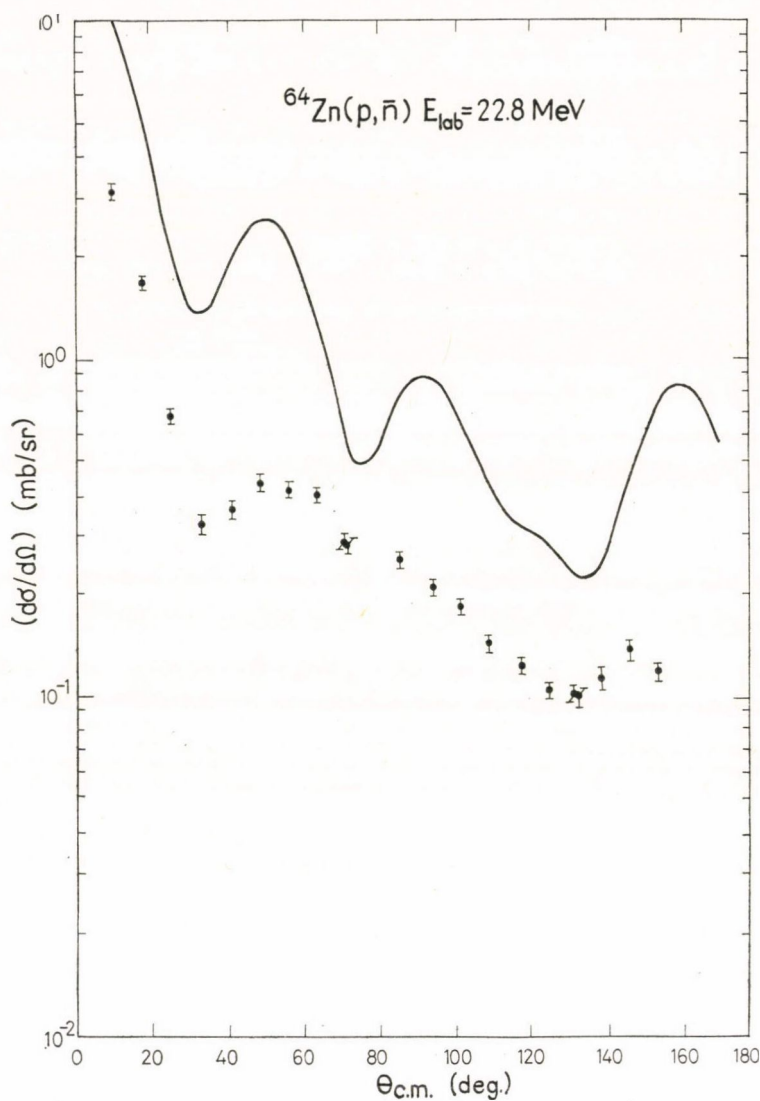


9. ábra

szigorú ilyesfajta megszorítást, nevezetesen azt, hogy  $\text{Re } U_1(r)$  legyen egyenlő a „korrekt” CLZ-potenciál valós részével, kipróbáltunk, de a Ni esetében nem segített (2. sorozat).

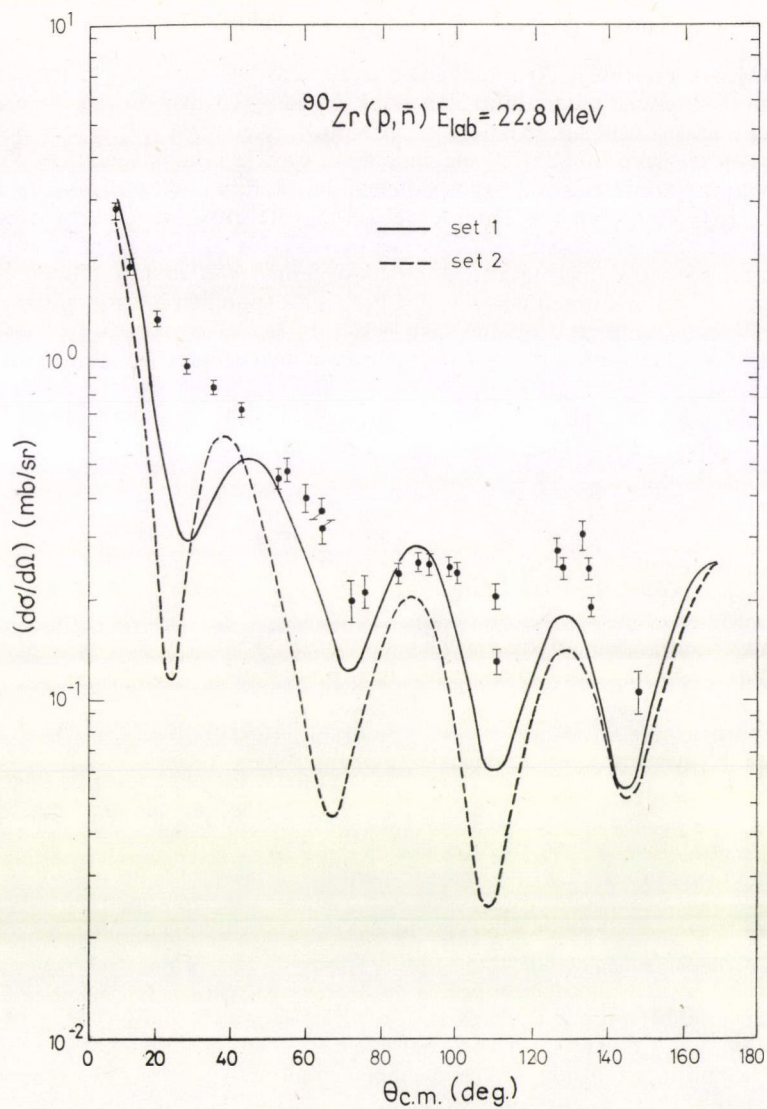
Itt is megvizsgáltuk annak a hatását, hogy az  $(n, n)$  illesztések többsége természetes izotópkeveréken mért adatokhoz történt. A  $^{58}\text{Ni}3$  jelű paramétersorozat,





9. ábra

melyet a  $^{58}\text{Ni}(n, n)$  méréshez illesztettünk, éppúgy nem alkalmas a  $(p, \bar{n})$  folyamat leírására, mint a másik kettő, s az ezektől való eltérése sem nagyobb, mint azoké egymástól, mely utóbbi a módszer belső bizonytalanságára mérhető. Így következtéseink hiteléből e közelítés nem von le.



9. ábra. A kísérleti [Ca-75] és a rugalmas nukleonszórásokból kivont Lane-potenciállal számolt  $(p, n)$  hatáskeresztmetszetek összehasonlítása



#### 4. §. 3. Az átlagos paraméterek konzisztenciája és a fluktuációk

Az ISM sikertelensége két tényezőre vezethető vissza: hogy lemondunk a BG-féle protonpotenciál használatáról és hogy  $U_1$ -et — kivált a  $W_{1D}/V_{1V}$  arányt — engedjük szabadon változni. Most megpróbáljuk értelmezni ezt a tapasztalatot.

Carlson és szerzőtársai [Ca-73] megmutatták, hogy a konzisztencia megőrződik, ha a BG-potenciált egy másik átlagos potenciállal, a Perey-félével [Pe-63] helyettesítik. Ez a tény a most nyert eredményekkel együtt erős érveléssel arra utal, hogy — szöges ellentétben Hoffmann és Coker sejtésével [Ho-74] — a konzisztencia csak átlagos protonpotenciál használatával tartható fenn. Hoffmann módszere inkonzisztens paramétereket szolgáltat — ez a 4. § elején exponált paradoxon megoldása. A módszerük sikerét illusztráló példákban [Ho-73b, Ho-74] a szerzők indokolatlanul [Ku-74] hagyták el az  $u_0(E_n) - u_0(E_p)$  tagot, s következtetlenül alkalmazták módszerüket: részben mégiscsak BG-potenciálokat használtak. Figyelemre méltó az is, hogy számolási eredményeiket vagy relatív szögeloszlás- és gerjesztésfüggvény-mérésekkel vetették egybe [Ho-73b], vagy a számolási eredményeket normálták önkényesen [Ho-74, Ku-74]. Mindez segített abban, hogy jó egyezést sikerült elérniük a  $(p, \bar{n})$  kísérletekkel.

Az átlagos potenciálok szerepe akkor érthető meg, ha felidézük, hogy a Pauli-elv miatt a szórt protonok a neutronokkal erősebben hatnak kölcsön, ezért a neutronhéj szerkezetét erősebben érzik, mint a protonokét, a neutronok pedig fordítva [Sa-69]. Így természetes feltennünk, hogy a proton és a neutron optikai potenciálja magról magra nem ugyanabban a fázisban fluktuál. Ezért, ha követjük a protonpotenciál fluktuációját, ez általában eltérést eredményez a mérsékeltén korrekten átlagos neutronpotenciáltól és viszont. Ha pedig jó illesztést erőszakolunk ki mind a  $(p, p)$ , mind az  $(n, n)$  szórásban, ez komolyan eltorzíthatja  $U_1$ -et. Valószínűleg nem véletlen, hogy a BG-protonpotenciáltól való eltávolodás épp a duplán mágikus  $^{90}\text{Zr}$  esetében okozott minimális hibát az  $(n, n)$ -ben. Ebből a szemszögből az is világossá válik, hogy egy átlagos, de egyedi esetekre is jó  $U_1$ -et nehéz megalkotni, mert a  $(p, \bar{n})$  reakció a neutrontöbbletre, tehát mind a neutron-, mind a protonhéj szerkezetére érzékeny. A CLZ-analízisek példája (4. ábra) mutatja, hogy — hacsak követelményeinket nem szállítjuk mélyre —  $U_1$ -et valamiképpen egyedileg kell illeszteni. Az ISM negatív példája az  $U_1$  paramétereire alkalmazandó megszorítások fontosságára hívja föl a figyelmet.

Ha a Lane-modell fenomenologikus paraméterei inkonzisztensek, ez két dolog következménye lehet: vagy az  $u_0$ -ra és az  $u_1$ -re (1.10)-ben adott különböző kifejezések nem egyenlők, vagy olyan (nem direkt) folyamatok adnak járulékat az elasztikus és a kváziasztikus szóráshoz, amelyek hatása nem sűrítendő (3.14) mintájára egy izospinmegőrző  $V(1, 2)$  kéttest-kölcsönhatásba. Az (1.10) egyenlőségeinek érvénye a  $\Phi_{T_0 T_0}$  és a  $\Phi_{T_0, T_0-1}$  tér-spin részének egyenlőségét feltételezi, ami a Coulomb-kölcsönhatás léte miatt nyilvánvalóan csupán közelítés. Mindkét hatás megszerkezet-függő, így érthető, hogy nemcsak az  $U_1$  tag maga, hanem a konzisztencia teljesülése is héjfluktuációkat mutat. Mivel azonban a Coulomb-hatásban kevesebb ingadozást várunk, az átlagos paraméterekkel megőrződő, de az egyediekben megsérülő konzisztenciát a priori inkább a dinamikai tulajdonságokhoz rendeljük. A nehéz magokban már az átlagos módszerrel sem sikerült kielégítő Lane-potenciált szerkeszteni [Sc-74b]; okoskodásunkkal e tény a felhalmozódott Coulomb-hatásoknak tulajdoníthatjuk.



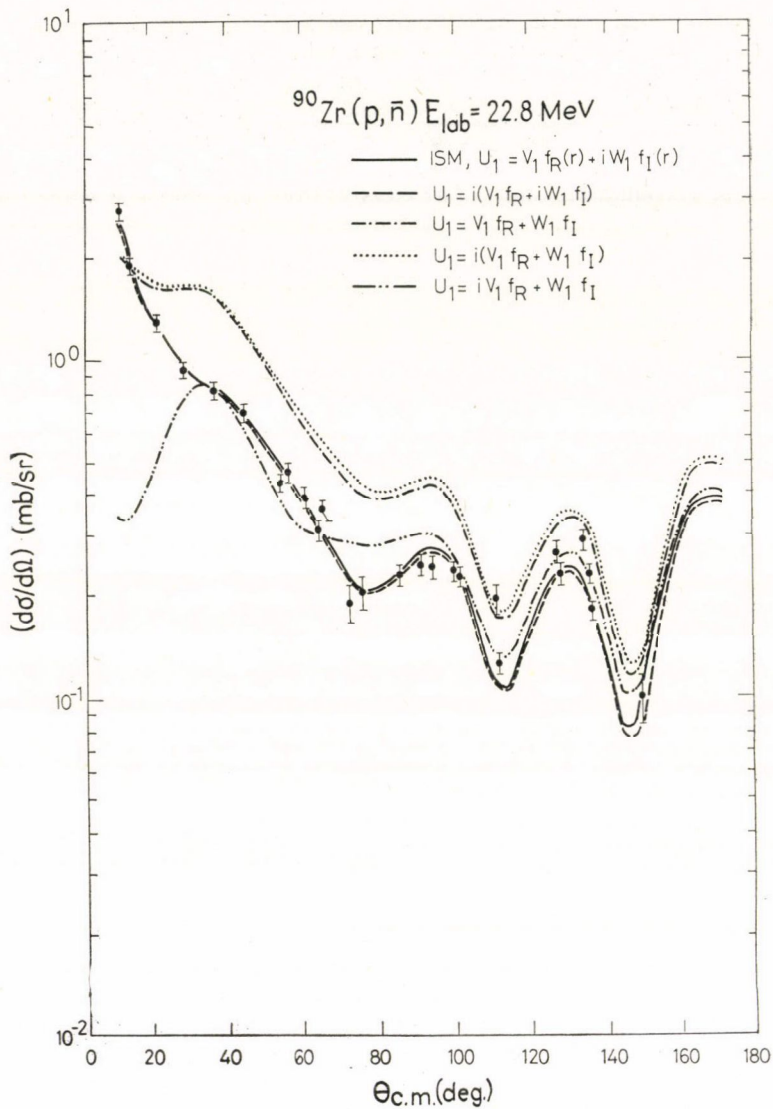
A reakciódinamikai hatásokra vonatkozó sejtéssel eljutottunk a reakcióelmélet egyik legégetőbb problémájához: a direkt és a féldirekt folyamatok megkülönböztetésének kérdéséhez. A féldirekt folyamatokat  $(p, \bar{n})$  szórásban több szerző szerint [Wo-72b, Ho-73a] annak alapján lehetne elkülöníteni, hogy járulékokat az  $\text{Im } U_1$ -hez rendeljük. Ezt a felfogást azonban a több lépcsős folyamatokról eddig szerzett tapasztalataink megkérdőjelezzik. A  $(p, p)$  szórásban fellépő  $(p, d; d, p)$  hatás vizsgálata azt mutatja, hogy az az egyszerű optikai potenciál valós tagjához is jelentősen hozzájárul [Ma-73]. Másrészt a  $(p, \bar{n})$ -ben jelen levő felcsípő-lefosztó folyamatról [Ri-73] és inelasztikus hatásról [Ma-76] az derült ki, hogy a direkt átmenettel erősen destruktíve interferál, a térfogati  $\text{Re } u_1$  és a felületi  $\text{Im } u_1$  járuléka között viszont enyhén konstruktív interferencia van. Mindazonáltal kétségtelen, hogy a felületi  $\text{Im } u_1$  a reakciómechanizmussal szorosabb kapcsolatban van, mint a térfogati  $\text{Re } u_1$ : *Patterson* és munkatársai úgy találták, hogy 25 és 45 MeV között csak  $\text{Im } u_1$  mutat energiafüggést [Pa-76].

A képzetes rész és a több lépcsős folyamatok kapcsolatára látszik utalni az is, hogy az ISM részben azzal rontja el a konzisztenciát, hogy  $U_1$  képzetes részét a valós résszel szemben a  $W_{1D}/V_{1V} = \frac{1}{2}$ -hez képest megnöveli. Egyedi illesztésekben a felületi képzetes rész súlyának növekedését mások is megfigyelték [Gr-75]. Ez a tendencia azonban úgy is értékelhető például, hogy a felületi tag kíván nagyobb részt magának. A  $(p, \bar{n})$  analízis ugyanis nem általában  $V_{\bar{n}p}$  képzetes és valós részének arányára érzékeny — ha ezek azonos alakúak lennének, arányukra teljesen érzéketlen volna —, hanem két különböző valós formafaktorú tag relatív fázisára. Ezt illusztrálja a 10. ábra. Ha egyidejűleg  $u_0$ -t is változni engedjük, az  $U_1$  abszolút fázisának megváltozására a  $(p, p)$  illesztése sem tesz béklyót. Ez azt jelenti, hogy az analízisból  $U_1$ -re nyert abszolút fázis csak akkor irányadó, ha legalább a valós vagy a képzetes formafaktor egyikét fizikai alapon rögzíteni tudtuk. Erre talán már a hozzáférhető mikroszkopikus aszimmetriapotenciálok is megfelelnek.

Az egy- és többlépéses folyamatok járulékanak szétválasztására újabb lehetőséget kínál, hogy a proton optikai potenciáljában explicit pályamomentum-függés jelei mutatkoznak, s ezt a többlépéses folyamatokkal hozták kapcsolatba [Ma-77a]. Ez az  $l$ -függés a kvázielasztikus szórásban is feltehetőleg föllép, s ha így van, itt is ez az értelmezés kínálkozik [Ma-77b]. Mi a következőkben az aszimmetriatagra talált ingadozást a mikroszkopikus modell jóslatával vetjük egybe, és így próbálunk konkrét esetekben az ingadozás okára rávilágítani.

Az ebben a §-ban mondottakat összefoglalva megállapíthatjuk, hogy a  $(p, p)$ , a  $(p, \bar{n})$  és az  $(n, n)$  szórási folyamat közül bármely kettőhöz való alapos egyedi illesztéssel kapott paraméterek a harmadik folyamatot általában képtelenek leírni. Következtetésünk az, hogy a Lane-modell csak átlagpotenciálokra korrekt — az átlagos potenciálok megszokott pontosságával. Paramétereinek meghatározására gyakorlatilag csak a  $(p, \bar{n})$ -beli illesztés útja járható. A CLZ-módszer sikere abban áll, hogy a benne alkalmazott  $W_{1D}/V_{1V} = \frac{1}{2}$  megszorítással elérhető, hogy  $U_1$  megőrizze átlagos sajátosságait.





10. ábra. A  $(p, \bar{n})$  hatáskeresztmetszet érzékenysége  $V_{\bar{n}p}$  tagjainak fázisára rögzített diagonális potenciálok mellett. Az egymáshoz közel futó görbepárokban azonos relatív, de különböző abszolút fázisú térfogati és felületi tagok szerepelnek. A DWBA-ban ez a kis különbségük is eltűnik [(3.2) formula]

### 5. §. Fluktuációk páros-páros magok aszimmetriapotenciáljában

Az előző §-ban láttuk, hogy a teljes izospint megőrző nukleon-optikaipotenciál nem képes az egyes magokon végbemenő elasztikus és kváziasztikus szórást kimerítően leírni, ám sok magra átlagolt formájában értelmes közelítés. Az „átlagolt” fogalmába itt beleérthető egy olyan  $(p, \bar{n})$ -beli egyedi optimalizálás, amely nem engedi, hogy  $U_1$  a proton átlagpotenciáljának aszimmetriafüggésétől túlzottan elrugaskodjék. Így az  $U_1$  a konzisztens Lane-potenciálban is magról magra fluktuál. Beláttuk, hogy ez a fluktuáció természetes, hiszen az  $U_1$  érzékenyen függ a neutronfölösleg szerkezetétől. Kvantitatív megértéséhez a mikroszkopikus modellhez fordulhatunk. A 3. §. 2. pontjában mondtak szerint nem nulla spinű, tehát nem páros-páros magokban a nukleon—nukleon kölcsönhatás nem nulla multipólusú és spinátbillentő tagjai is hozzájárulnak a folyamathoz, ami explicit eltérést jelent egy gömbszimmetrikus Lane-modelltől. Ezért ezt az esetet a 6. §-ban külön tárgyaljuk. A páros-páros magokon végbemenő  $(p, \bar{n})$  átmenet mechanizmusát azonban a Lane-modell éppen olyan pontossággal írja le, mint a mikroszkopikus modell, s most figyelmünk tárgya az ilyen átmenetek által felfedett ingadozás. A mikroszkopikus modell ezeket héjdiszkontinuitásokra vezeti vissza, melyek (1.10) szerint vagy a hullámfüggvényben vagy az effektív kölcsönhatásban jelentkezhetnek. Mivel azonban — mint a 3. §. 2. pontjában láttuk — sikerült túrhetően állandó effektív nukleon—nukleon kölcsönhatással leírni a  $(p, \bar{n})$  átmeneteket [Do-75], megkísérélhető a  $V(1, 2)$  magfüggetlenségének a feltételezése. Ezzel a hipotézissel tehát kizárólag a hullámfüggvény neutronfölösleget leíró részében fellépő magról magra való egyenetlen változásnak tulajdonítjuk az ingadozást. A neutronfölösleg hullámfüggvénye pedig az egymás után betöltődő pályák közötti alaki különbség miatt változik egyenetlenül.

A héjeffektusokat így azokon a magokon lehet legkönnyebben megbecsülni, amelyeket egy mágikus szám választ el, mint pl. a  $^{54}\text{Fe}_{28}$  és a  $^{58}\text{Ni}_{30}$ . Egy köztük elhelyezkedő magban — mint példánkban a  $^{56}\text{Fe}_{30}$ -ban — a neutrontöbblet több héjon oszlik szét, ezért a végmagban az izobár analóg állapot  $T=[(N-Z)/2-1]$ -es ellenpárja, az antianalóg állapot is létezik. Ugyanaz az ok, amelynek az  $U_1$  magok közötti változását próbáljuk tulajdonítani, a kétféle egyrészcseke-állapot közötti nem teljes átfedés hozza létre a  $(p, \bar{n})$ (AAS) átmeneteket (3. §. 2.). Jó lenne hát kapcsolatot teremteni az aszimmetriapotenciálok különbsége és a  $(p, \bar{n})$  átmenet között. Ha sikerül, ezzel makroszkopikus leírást adtunk a  $(p, \bar{n})$  szórásnak, és ha ez a leírás hű, az  $U_1$  magfüggését kvantitatíve megértettük. E program megvalósítását mutatjuk be az alábbiakban.

#### 5. §. 1. Összefüggés az aszimmetriapotenciál ingadozása és a $(p, \bar{n})$ (AAS) átmenetek között

Tekintsünk egy  ${}^A_ZX_N$  kétszer mágikus önkonjugált ( $N=Z$ ) magot, és legyen ennek alapállapota a  $|0\rangle$  vákuum. Jelöljük az ebben betöltött legfelső héjat  $j_\pi$ -vel, a legelső betöltetlen pedig  $j_\nu$ -vel. Tegyük fel, hogy az  ${}^A_{Z-2}Y_N$ , az  ${}^A_{Z-2}Y_{N+2}$  és az



$A_{Z,N+2}^{+2}$  mag alapállapota rendre  $j_\pi^{-2}$ ,  $j_\pi^{-2}j_v^2$  és  $j_v^2$  konfigurációjú:

$$\begin{aligned} |GS\rangle_{A-2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\tilde{a}_{j_\pi \frac{1}{2}} \times \tilde{a}_{j_\pi \frac{1}{2}}]_{0,1}^{(0,1)} |0\rangle, \\ |GS\rangle_A &= -\frac{1}{2} [[a_{j_v \frac{1}{2}}^+ \times a_{j_v \frac{1}{2}}^+]^{(0,1)} \times [\tilde{a}_{j_\pi \frac{1}{2}} \times \tilde{a}_{j_\pi \frac{1}{2}}]_{0,2}^{(0,1)}]^{(0,2)} |0\rangle, \\ |GS\rangle_{A+2} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} [a_{j_v \frac{1}{2}}^+ \times a_{j_v \frac{1}{2}}^+]_{0,1}^{(0,1)} |0\rangle, \end{aligned} \quad (5.1)$$

ahol az  $a_{jm \frac{1}{2}}^+$  és az  $\tilde{a}_{jm \frac{1}{2}} = (-)^{j+m+\frac{1}{2}+\tau} a_{j, -m \frac{1}{2}, -\tau}$  részecske-, illetve lyukkeltő operátor, és  $[\times]_{M, T_z}^{(J, T)}$  impulzusmomentum- és izospin-csatolást együtt jelöl:

$$[A_{j_1 t_1} \times A_{j_2 t_2}]_{M, T_z}^{(J, T)} = \sum_{m_1 m_2 \tau_1 \tau_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle \langle t_1 \tau_1 t_2 \tau_2 | TT_z \rangle A_{j_1 m_1 t_1 \tau_1} A_{j_2 m_2 t_2 \tau_2}. \quad (5.2)$$

Definíció szerint az  $|IAS\rangle$  ugyanolyan formájú, mint a  $|GS\rangle$ , de benne  $T_z = T-1$ , az  $|AAS\rangle$ -ben pedig az izospin kvantumszáma is eggyel kisebb:

$$\begin{aligned} |IAS\rangle_{A-2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\tilde{a}_{j_\pi \frac{1}{2}} \times \tilde{a}_{j_\pi \frac{1}{2}}]_{0,0}^{(0,1)} |0\rangle, \\ |IAS\rangle_A &= -\frac{1}{2} [[a_{j_v \frac{1}{2}}^+ \times a_{j_v \frac{1}{2}}^+]^{(0,1)} \times [\tilde{a}_{j_\pi \frac{1}{2}} \times \tilde{a}_{j_\pi \frac{1}{2}}]_{0,1}^{(0,1)}]_{0,1}^{(0,2)} |0\rangle, \\ |IAS\rangle_{A+2} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} [a_{j_v \frac{1}{2}}^+ \times a_{j_v \frac{1}{2}}^+]_{0,0}^{(0,1)} |0\rangle, \\ |AAS\rangle_A &= -\frac{1}{2} [[a_{j_v \frac{1}{2}}^+ \times a_{j_v \frac{1}{2}}^+]^{(0,1)} \times [\tilde{a}_{j_\pi \frac{1}{2}} \times \tilde{a}_{j_\pi \frac{1}{2}}]_{0,1}^{(0,1)}]_{0,1}^{(0,1)} |0\rangle. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Hanyagoljuk el a lövedék és a célmag nukleonjai közötti antiszimmetrizálást. Ez ésszerű közelítés, hiszen, mint mondtuk (3. §. 2.),  $L=0$  átmenetekre a kicserélődés járuléka csekély. Ekkor a teljes állapotvektor egyszerűen a célmag és a lövedék állapotvektorának a szorzata, az (1.8) kölcsönhatás pedig egyrészecske-operátor. A  $V_{\bar{n}p} = \langle IAS, v(0) | V_0(0) | GS, \pi(0) \rangle$ ,  $V_{\bar{n}p} = \langle AAS, v(0) | V_0(0) | GS, \pi(0) \rangle$  csatoló mátrixelemekben a potenciál minden tagjának a járuléka zérus, kivéve az

$$\frac{1}{2} \sum_i v_1 t_{0+} t_i - \pi(0) = \frac{1}{2} v(0) \sum_i v_1 t_i -$$

tagot, mely részecskeszám-reprezentációban

$$\frac{1}{2} v(0) \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | v_1 | \beta \rangle a_{\alpha \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^+ a_{\beta \frac{1}{2}} \quad (5.4)$$

alakú. Ennek ismeretében pl. a Wick-tétel alkalmazásával a mátrixelemek nehézség nélkül kiszámíthatók. Az eredmény pl.  $V_{\bar{n}p}(A-2)$ -re

$$V_{\bar{n}p}(A-2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2j_{\pi}+1} \sum_{m_{\pi}} \langle j_{\pi} m_{\pi} | v_1 | j_{\pi} m_{\pi} \rangle. \quad (5.5)$$

Mivel a (3.9) multipólus sorfejtés tagjai közül nulla spinű magállapotok közötti átmenetben csak az  $L=S=J=0$  tag mátrixeleme nem tűnik el, az (1.11) és  $\langle jm 00 | jm \rangle = 1$  felhasználásával kiderül, hogy az (5.5)-beli összeg minden tagja egyenlő. A  $j = \sqrt{2j+1}$  és a  $v_1^0 = v_{10} f_0(r_1, r_2)$  jelölés bevezetésével így az átmeneti mátrixelemekre a

$$V_{\bar{n}p}(A-2) = \frac{1}{\sqrt{2}} j_{\pi}^{-1} \langle j_{\pi} \| v_1^0 \| j_{\pi} \rangle, \quad (5.6)$$

$$V_{\bar{n}p}(A) = \frac{1}{2} (j_{\pi}^{-1} \langle j_{\pi} \| v_1^0 \| j_{\pi} \rangle + j_v^{-1} \langle j_v \| v_1^0 \| j_v \rangle), \quad (5.7)$$

$$V_{\bar{n}p}(A+2) = \frac{1}{\sqrt{2}} j_v^{-1} \langle j_v \| v_1^0 \| j_v \rangle, \quad (5.8)$$

$$V_{\bar{n}p}(A) = \frac{1}{2} (j_{\pi}^{-1} \langle j_{\pi} \| v_1^0 \| j_{\pi} \rangle - j_v^{-1} \langle j_v \| v_1^0 \| j_v \rangle) \quad (5.9)$$

képletek adódnak. Az (5.6—8) egyenletek bal oldala rendre  $\sqrt{1/2} u_1(A-2)$ -vel,  $u_1(A)$ -val és  $\sqrt{1/2} u_1(A+2)$ -vel fejezhető ki makroszkopikusan. Ez a megfeleltetés akkor is értelmes, ha  $u_1$  komplex, feltéve, hogy a makroszkopikus kölcsönhatás abszolút fázisa ismert. A különböző magokra képezett azonos kvantumszámú egyrészecske-állapotok közötti mátrixelemek azonosaknak — pl. mind  $A$ -hoz tartozóknak — tekinthetők, mert sugaraik kevéssé térnek el, és térfogati integráljaik közelítőleg egyenlők. Minthogy ily módon az (5.6—9) egyenletek jobb oldala mind ugyanannak a két függvénynek a kombinációja, a bal oldalon szereplő négy mennyiség közül kettő a többivel kifejezhető:

$$V_{\bar{n}p}(A) = \frac{1}{2} [u_1(A-2) + u_1(A+2)], \quad (5.10)$$

$$V_{\bar{n}p}(A) = \frac{1}{2} [u_1(A-2) - u_1(A+2)] \quad (5.11)$$

$$= u_1(A-2) - u_1(A) \quad (5.12)$$

$$= u_1(A) - u_1(A+2). \quad (5.13)$$

A levezetés utolsó lépésében kiaknáztuk azt a feltevést, hogy  $v_1$  minden itt szereplő magra azonos; ebben implicite az is benne van, hogy  $u_1$ -et ugyanazon energián határoztuk meg. Mihelyt minden egyrészecske-pályát  $A$ -hoz tartozónak értünk, az  $u_1$  argumentuma csupán  $u_1$  paramétereit jelöli; sugarában mindig  $A^{\frac{1}{2}}$  szerepel.



Az (5.11—13) egyenletek adják az aszimmetriapotenciálok közötti különbség és a  $(p, \bar{n})$  átmenet mátrixeleme között a kívánt megfeleltetést, az (5.10) pedig egy konzisztenciaellenőrzésre alkalmas további összefüggés. Látjuk, hogy ebben a modellben  $(p, \bar{n})$  átmenet és az aszimmetriapotenciál változása csakis egyszerre létezhet.

#### 5. §. 2. $A$ $^{56}\text{Fe}(p, \bar{n})$ és az $^{40}\text{Ar}(p, \bar{n})$ folyamat leírása Lane-potenciállal

A direkt reakciók energiatartományában a számunkra ismert két  $(p, \bar{n})$ (AAS) mérést mágikus  $Z=N$  környéki  ${}_{Z-2}^{A}Y_{N+2}$  típusú magon végezték. A coloradói csoport [Fi-74, Ca-75] a  $j_{\pi}=1f_{7/2}$ ,  $j_v=2p_{3/2}$  esetére a modellben szereplő összes folyamatra — a  $^{54}\text{Fe}(p, \bar{n})$ -re, a  $^{56}\text{Fe}(p, \bar{n})$ -re, a  $^{58}\text{Ni}(p, \bar{n})$ -re és a  $^{56}\text{Fe}(p, \bar{n})$ -re — végzett hatáskeresztmetszet-mérést  $E_p=22,8$  MeV energián. Bár ezen magok alapállapota bonyolultabb, mint amit róluk az (5.1) egyenletekben feltételeztünk [Ko-77], egymáshoz való viszonyuk hasonló az (5.1)-ben kifejezett relációhoz: a  $|\text{GS}\rangle_A$ -nak (a  $|\text{GS}\rangle_{A+2}$ -nek) az a komponense, amely a  $|\text{GS}\rangle_{A-2}$ -ből (a  $|\text{GS}\rangle_A$ -ból) nulla impulzuszmomentumúvá csatolt nukleonpár hozzáadásával épül fel, közel egységnyi súlyú [Al-75]. Ezért ezt az esetet az (5.10—13) egyenletek próbakövének tekintjük.

A Lane-potenciál céljainkra alkalmas függvényformájának kiválasztásakor korlátozott ismereteink miatt kompromisszummal kell beérnünk. Mivel az (5.11—13)-ban közel egyenlő mennyiségek kis különbségét kell képeznünk,  $u_1$  abszolút fázisában kis pontatlanság is nagy hibát okoz. Ezért  $u_1$  valós parametrizálása mellett döntöttünk, és a könnyű magokra bevált (3. ábra) felületi típusú formafaktort választottuk a  $(p, p)$  és az  $(n, n)$  szórásra korrekt CLZ-féle neutronpotenciálhoz való olyan mértékű ragaszkodással, amely mellett az izospin is közelítőleg megőrződik. Az  $u_1$  három,  $(p, \bar{n})$ -hez illesztett paraméterét a 4. táblázatban adjuk meg.

#### 4. TÁBLÁZAT

Az aszimmetriapotenciálok paraméterei

Céltárgy	$V_{1D}$	$r_{1D}$	$a_{1D}$
$^{54}\text{Fe}$	19,58	0,74	1,04
$^{56}\text{Fe}$	18,51	0,71	1,22
$^{58}\text{Ni}$	21,03	0,32	1,58
$^{40}\text{Ar}$	26,17	1,00	0,70
$^{48}\text{Ca}$	24,56	1,00	0,70

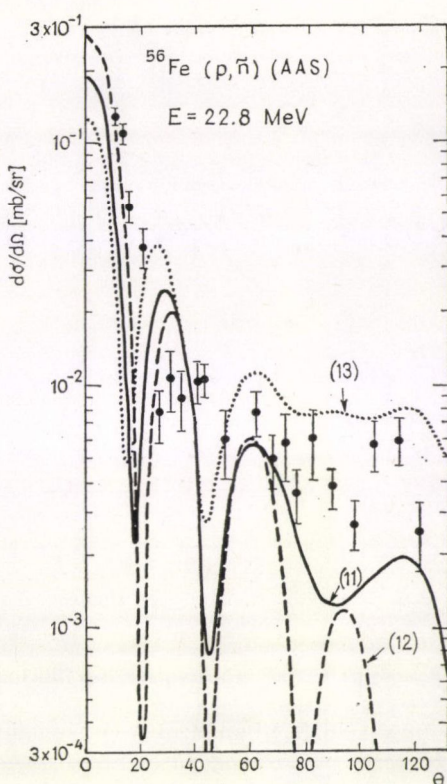
A  $^{56}\text{Fe}(p, \bar{n})$  folyamatot (5.10) majdnem olyan jól leírja, mint a hozzá illesztett  $u_1$  (56). A  $(p, \bar{n})$  hatáskeresztmetszet kiszámolásához az  $u_n$  energiafüggésére korrigált CLZ-féle optikai potenciálokat használtunk. Az eredményt a 11. ábrán hasonlítjuk össze a kísérlettel.

Az  $u_1$  tagok teljesen különböző formái miatt a csatolási tagokban oszcillációk vannak, s ez okoz mély minimumokat a hatáskeresztmetszet-görbéken. E modellben megkötések nélkül bármely  $u_1$ -optimalizáció ezzel a hátránnyal jár, de ettől eltekintve a három görbe meglepően konzisztens, és az adatokkal egész jó egyezésben van. (Az egyezés jobb, mint amit a rafinált mikroszkopikus modellek adnak [Fi-74].)



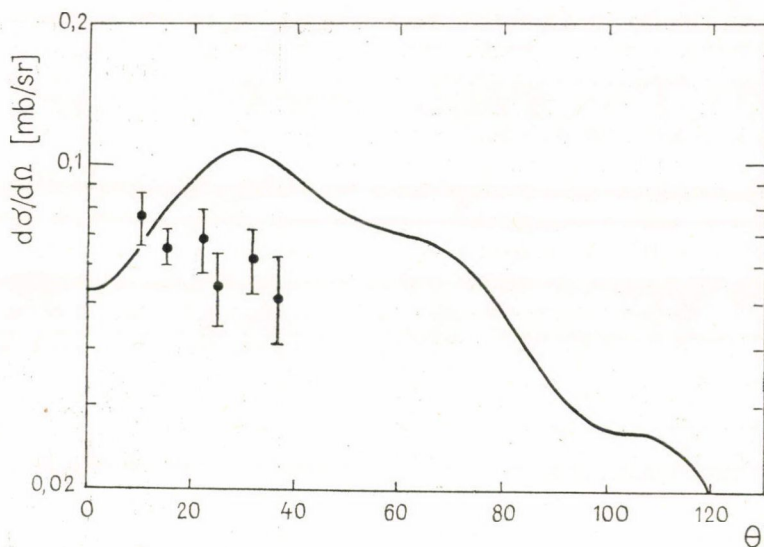
A másik számba jövő  $(p, \bar{n})$  mérést  $E_p = 24$  MeV-en az  $^{40}\text{Ar}$ -en hajtották végre [Ga-73]. E mag állapotában a modellben feltételezett  $\pi 1d_{3/2}^{-2} \nu 1f_{7/2}^2$  konfiguráció valóban domináns [Ja-69]. Sajnos az  $^{38}\text{Ar}$   $(p, \bar{n})$  és a  $^{42}\text{Ca}$   $(p, \bar{n})$  mérés nem áll rendelkezésünkre, azonban az  $^{40}\text{Ar}$   $(p, \bar{n})$ -t mérték 22,8 MeV-en [Ca-75], a  $^{48}\text{Ca}$   $(p, \bar{n})$ -t pedig 25 MeV-en [Do-75]. Mivel Hartree—Fok-számítások azt mutatják, hogy  $u_1$  a Ca-izotópokon — e modellel összhangban — kevésbé ingadozik (3. ábra), megpróbáltuk  $u_1(A+2)$ -t a  $^{48}\text{Ca}$ -on meghatározni a  $^{42}\text{Ca}$  helyett. Megnyugtató volt, hogy ez az  $u_1(A+2)$  csaknem egzaktul ugyanolyan alakúnak adódott, mint az  $^{40}\text{Ar}$   $(p, \bar{n})$  illesztéséből nyert  $u_1(A)$ . Ezért az illesztést megismételtük egymással egyenlőnek rögzített geometriai paraméterekkel (4. táblázat). Ha figyelembe vesszük, hogy az egymással csaknem egyenlő aszimmetriatagoknak különbségükkel milyen finom egyensúlyt kell megteremteniük, az egyezés a mérésekkel kielégítő (12. ábra).

Az eredmények arra utalnak, hogy a  $(p, \bar{n})$  és a  $(p, \bar{n})$  átmenetek valóban kapcsolatba hozhatók a makroszkopikus szinten is. Ezzel, miközben a  $(p, \bar{n})$  folyamat leírásában egy új módszerhez futottunk, a Lane-modell alapfeltevéseinek és az effektív nukleon—nukleon kölcsönhatás tulajdonságainak megértéséhez is közelebb kerültünk. Duplán zárt héjú önkonjugált magok szomszédságába eső páros-páros magok esetére megtaláltuk azt a leglényegesebb hatást, amiről a Lane-modell formulái nem tudnak, de a valóságos folyamathoz illesztett paraméterei szabálytalan viselkedésükkel számot adnak róla. Az aszimmetriapotenenciál ingadozását itt azok a héjefektusok okozzák, amelyek a  $(p, \bar{n})(\text{AAS})$  átmeneteket lehetővé teszik. Ez a tapasztalat megerősíti a modell mélyén rejlő alapfeltevést, a különböző magokban működő konzisztensen definiált effektív nukleon—nukleon kölcsönhatás izovektor tagjának azonosságát. Ez a konklúzió annál inkább figyelemre méltó, mert ebben a modellben az effektív kölcsönhatást tettük felelőssé minden a folyamatban jelenlevő mechanizmusért, amelyek közül a jelek szerint [Fi-74] sem a  $(p, d; d, \bar{n})$ , sem a  $(p, d; d, \bar{n})$  nem elhanyagolható.



II. ábra. Az  $E_p = 22,8$  MeV energián mért  $^{56}\text{Fe}(p, \bar{n})(\text{AAS})$  hatáskeresztmetszet [Fi-74] összehasonlítása az (5.11—13) átmeneti mátrixelemek szolgáltatta keresztmetszettel





12. ábra. Az  $E_p = 24$  MeV energián mért  $^{40}\text{Ar}(p, \bar{n})$  (AAS) hatáskeresztmetszet [Ga-73] összehasonlítása az (5.13) átmeneti mátrixelem szolgáltatja keresztmetszettel

### 6. §. Páros-páratlan fluktuációk az aszimmetriapotenciálban

Az előző §-ban azokat az ingadozásokat tanulmányoztuk, amelyeket a héjszerkezeti változások páros-páros magok aszimmetriapotenciáljában okoznak. Zárt törzs környéki magokat vizsgáltunk, mert a héjszerkezeti változás ott a legegyszerűbb. A kiszemelt esetekben az effektív nukleon—nukleon erő állandóságának feltételezésével az  $U_1$  változását értelmezni tudtuk. Ezen értelmezés annak köszönhető, hogy létezik egy olyan folyamat, a  $(p, \bar{n})$ (AAS), amely pontosan e héjszerkezeti különbségek révén megy végbe.

Most hasonló programot próbálunk végigvinni páros és páratlan magok közötti fluktuációkra. A különbség először is abból adódik, amiről már az előző §-ban is szót ejtettünk: e magokra az impulzusmomentum-átadó („ $J \neq 0$ ”) átmenetek miatt a Lane-modell eredendően inadekvát. Ennek ellenére sok-sok analízist hajtottak végre vele páratlan magokon, ezért érdemes ezek hatását megvizsgálni. Az  $L \neq 0$  átmenetek létezése miatt a kiütési kicserélődéstől nem tekinthetünk el. Mivel a  $J \neq 0$  mechanizmus a  $(p, \bar{n})$  folyamatban is benne van, s ennek járulékát nem vagy csak alig kicsinyíti az ellenkező előjelű tagok kioltódása, a  $(p, \bar{n})$  folyamat itt nem használható arra, amire a páros-páros magok körében. Így nem kerülhetjük el a nukleon—nukleon kölcsönhatással való explicit számolást. Ha viszont számolnunk kell vele, akkor kihasználhatjuk az előző § eredményeivel is megerősített tulajdonságait: azt, hogy sok esetben és a szomszédos magok között is jó közelítésben állandó, és hogy figyelembe veszi a lövedéknek és egy valencianukleonnak az összes többi nukleon alkotta passzív törzs jelenlétében lezajló teljes kölcsönhatását (3. §. 2.). Egy tipikus példán, a  $^{91}\text{Zr}$ -en végbemenő szórásban, megbecsüljük, hogy konstans nukleon—nukleon erő feltételezésével a páratlan nukleon jelenlétében mekkora elté-



rést várunk az állandó paraméterű Lane-modelltől (3. pont), majd annak ismeretében, hogy a kölcsönhatás mit foglal magában, egy rendellenesen viselkedő triádra, a  $^{25}\text{Mg}$ ,  $^{26}\text{Mg}$ ,  $^{27}\text{Al}$  együttesére, analízist végzünk, hogy az anomália okát kiderítsük (4. pont).

Most is zárt törzs környékére szorítkozunk. Egyszerűsége mellett előnye ennek a tartománynak, hogy vele az effektust felülről becsüljük meg, mivel a héjingoadozások éppen zárt héj körül a legnagyobbak. Nem korlátozódunk viszont önkonjugált törzsre; így az AAS most is létezhet. Modellünkben a lövedék, a törzs és a rajta ülő nukleon vagy lyuk („kvázirészecske”) kölcsönhatása páronként egy izoskalár és egy izovektor tag összege. A törzs és egy részecske kölcsönhatását a törzs Lane-potenciáljával, a részecskékét egymással pedig egy (3.8) típusú lokális fenomenologikus effektív erővel azonosítjuk. Mivel feltételezzük, hogy ez magról magra változatlan, úgy kell megválasztanunk, hogy — mikroszkopikusan — ugyancsak a törzsön való  $(p, \bar{n})$  szórás leírására legyen alkalmas. A kölcsönhatás ilyen választása mellett az analízis illesztendő paraméterektől mentes lesz.

Mínthogy mind nukleon—nukleon erőre, mind nukleon—mag kölcsönhatásra hivatkozunk, e szkémát félmikroszkopikusnak mondjuk. Modellünk elődeit  $(d, p)$  és  $(d, \bar{n})$  reakciók tárgyalására [Zi-68b] és IAR-k háromtest-leírására [Be-70] vezették be. A deuteroncsatorna bevételeivel modellünket mi is kiterjesztjük; ez és ennek alkalmazása azonban már a IV. fejezet tárgya.

#### 6. §. 1. Modell zárt héjjal szomszédos magon végbemenő töltéscsere leírására

A  $t$  célmagról feltételezzük, hogy alapállapotában egy  $c$  törzsből és egy 1 jelű kvázirészecskéből áll:  $t=c+n$ ,  $c-n$ ,  $c+p$  vagy  $c-p$ . A négy eset közül itt a modell egyenleteit csak egyre,  $t=c+n$ -re vezetjük le. A partíciók azonos kezelésének köszönhetően megközelítésünk megőrzi a Lane-modell szkematikus formáját, miközben — ha az AAS létezik — a  $(p, \bar{n})$  folyamatot a  $(p, p)$ -vel és a  $(p, \bar{n})$ -nel azonos alapon tárgyalja. A levezetés során a  $t$  és a lövedék (2-es részecske) közötti antiszimmetriát figyelmen kívül hagyjuk. A  $c$  és a 2 antiszimmetriájának a hatását kölcsönhatásuk fenomenologikusan tartalmazza (3. §. 2.), hiszen reprodukálja a kísérleteket, az 1 és a 2 közti antiszimmetriát viszont egy fenomenologikus közelítő módszerrel utólag vesszük tekintetbe. A  $c$  és az 1 antiszimmetriáját nem hanyagoltuk el; mivel azonban ez  $t=c+n$  (csakúgy, mint  $t=c-p$ ) esetén az eredményül kapott egyenleteket nem befolyásolta, az egyszerűség kedvéért az itt bemutatandó levezetés során szintén eltekintünk tőle. A Függelékben azonban a példa kedvéért megadjuk a  $t=c-n$  eset korrekt, ezen antiszimmetriát tartalmazó levezetését. Hasonlóképpen juthatunk a  $t=c+n$  problémájában a most bemutatandó egyenletekkel azonos eredményre.

A teljes  $t+2=c+1+2$  rendszer modellünkbeli Hamilton-operátorát a

$$H = H_c + H_{1c} + H_{2t} \quad (6.1)$$

formába írjuk, ahol  $H_c$  a törzs belső Hamilton-operátora,

$$H_{1c} = K_{1c} + V(1, c), \quad (6.2)$$

$$H_{2t} = K_{2t} + V(2, t) = K_{2t} + V(2, c) + V(1, 2),$$



ezekben pedig  $K_{ij}$  kinetikus,  $V(i, j)$  potenciális energiát jelöl, és  $ij$  az  $i$  fragmentumot  $j$ -hez viszonyítja. Posztulátumaink szerint a kölcsönhatás

$$V(i, c) = u_0(r_i) + u_1(r_i) \vec{T}_c \cdot \vec{t}_i + \left( \frac{1}{2} - t_{iz} \right) V_c \quad (\vec{r}_i = \vec{r}_{ic}; i = 1, 2),$$

$$V(1, 2) = v_0 + v_1 \vec{t}_1 \cdot \vec{t}_2 = v_0 + v'_1 \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2, \quad (6.3)$$

ahol az  $u_0$  spin—pálya tagot tartalmaz. Célunk az (1.3) Schrödinger-egyenletnek olyan közelítő megoldását találni, amely leírja a  $t+2$  rendszer töltéscserélő szórást. Mivel a modell sajátos vonásait izospinszerkezete tartalmazza, csak ennek bemutatására szorítkozunk.

A modell feltevése az, hogy a célmag  $TT_z$  kvantumszámú állapotait leíró

$$(H_c + H_{1c}) \Phi_{TT_z} = E_{TT_z} \Phi_{TT_z} \quad (6.4)$$

egyenletben az alapállapot

$$\Phi_{T_0 T_0} = \Xi_{T_c T_c} \varphi_n^{T_0 T_0}(\vec{r}_1) v(1) \quad \left( T_c = T_0 - \frac{1}{2} \right) \quad (6.5)$$

alakú, s ebben  $\varphi_n^{T_0 T_0}$  és  $\Xi_{T' T'_z}$  speciális eseteként —  $\Xi_{T_c T_c}$  a

$$H_c \Xi_{T' T'_z} = \varepsilon_{T' T'_z} \Xi_{T' T'_z} \quad (6.6)$$

$$\left[ K_{1c} + u_0 + \frac{2T_0 - 1}{4} u_1 - (E_{T_0 T_0} - \varepsilon_{T_c T_c}) \right] \varphi_n^{T_0 T_0} = 0 \quad (6.7)$$

egyenleteknek tesz eleget. Az utóbbi egyenlet — a kötött állapoti határfeltételekkel — a  $c+n$  rendszerre alkalmazott (1.14) egyrészecske-problémának a kötött állapotok tartományába való kiterjesztése.

Tételezzük fel, hogy azelasztikus szórástól eltekintve csak direkt töltéscserélő reakciók mehetnek végbe. Akkor a végállapot kizárólag  $\Phi_{T_0 T_0}$ ,  $\Phi_{T_0, T_0-1}$ , és  $\Phi_{T_0-1, T_0-1}$  (a 3. §. 2. pontja szerinti jelölésben ez az AAS) lehet, így a teljes hullámfüggvény

$$\Psi = \Phi_{T_0 T_0} \chi_p \pi(2) + \Phi_{T_0, T_0-1} \chi_{\bar{n}} v(2) + \Phi_{T_0-1, T_0-1} \chi_{\bar{n}} v(2) \quad (6.8)$$

alakba írható. Ha az izovektor kölcsönhatást egy pillanatra elhanyagoljuk, az IAS és az AAS hullámfüggvényét

$$\Phi_{T_0, T_0-1} = (2T_0)^{-\frac{1}{2}} \left[ \Xi_{T_c T_c} \varphi_p^{T_0, T_0-1} \pi(1) + (2T_0 - 1)^{\frac{1}{2}} \Xi_{T_c, T_c-1} \varphi_n^{T_0, T_0-1} v(1) \right] \quad (6.9)$$

$$\Phi_{T_0-1, T_0-1} = (2T_0)^{-\frac{1}{2}} \left[ (2T_0 - 1)^{\frac{1}{2}} \Xi_{T_c T_c} \varphi_p^{T_0-1, T_0-1} \pi(1) - \Xi_{T_c, T_c-1} \varphi_n^{T_0-1, T_0-1} v(1) \right]$$

szerint Clebsch—Gordan-sorba fejthetjük, ahol minden  $\varphi$  azonos és normált. Nem élve e közelítéssel, korrekt sajátérték-egyenleteket nyerünk rájuk, ha  $\Phi_{T_0, T_0-1}$ -et és  $\Phi_{T_0-1, T_0-1}$ -et

$$\Phi_{i, T_0-1} = N_i [\Xi_{T_c T_c} \hat{\varphi}_p^{i, T_0-1} \pi(1) + \Xi_{T_c, T_c-1} \hat{\varphi}_n^{i, T_0-1} v(1)] \quad (i = T_0, T_0 - 1) \quad (6.10)$$

alakban fejezzük ki, és ezt (6.4)-be behelyettesítjük:

$$\left[ K_{1c} + u_0 - \frac{2T_0 - 1}{4} u_1 + V_c - (E_{i, T_0 - 1} - \varepsilon_{T_c, T_c}) \right] \hat{\phi}_p^{i, T_0 - 1} + \frac{(2T_0 - 1)^{\frac{1}{2}}}{2} u_1 \hat{\phi}_n^{i, T_0 - 1} = 0, \quad (6.11)$$

$$\left[ K_{1c} + u_0 + \frac{2T_0 - 3}{4} u_1 - (E_{i, T_0 - 1} - \varepsilon_{T_c, T_c - 1}) \right] \hat{\phi}_n^{i, T_0 - 1} + \frac{(2T_0 - 1)^{\frac{1}{2}}}{2} u_1 \hat{\phi}_p^{i, T_0 - 1} = 0$$

$$(i = T_0, T_0 - 1).$$

Ezekben a  $c+1$  rendszer egy-egy diszkrét energiájában fennálló (1.13) Lane-egyenletekre ismerünk. A (6.9) a (6.10)-nek azért nem jó közelítése általában, mert a nagy energiakülönbségek miatt a  $\hat{\phi}$ -k aszimptotikus viselkedése nagyon különböző. A  $\hat{\phi}$ -k normájára és egymással képezett fedési integráljaira azonban a (6.9) jobb oldalának együtthatói kielégítően pontosak, ezért érvényesnek fogadjuk el őket. Ezt a közelítést a  $\hat{\phi}$ -k térbeli alakjának megtartásával úgy egyeztetethetjük össze, hogy a  $\Phi_{i, T_0 - 1}$  függvényeket (6.9) formájúaknak vesszük, de a bennük szereplő  $\phi$ -ket a

$$\phi_j^{i, T_0 - 1} = \langle \hat{\phi}_j^{i, T_0 - 1} | \hat{\phi}_j^{i, T_0 - 1} \rangle^{-\frac{1}{2}} \hat{\phi}_j^{i, T_0 - 1} \quad (i = T_0, T_0 - 1; j = p, n) \quad (6.12)$$

definícióval a Lane-egyenletek megoldásából számítjuk. Ha  $\Phi_{T_0, T_0 - 1}$  vagy  $\Phi_{T_0 - 1, T_0 - 1}$  rezonáns, (6.11)-et továbbra is diszkrét sajátérték-problémának tekintjük, melyben  $\phi_p^{i, T_0 - 1}$  a diszkrét rezonanciaállapot egyik definíciójának megfelelő peremfeltételnek és normálási előírásnak tesz eleget [Gy-71a, Gy-71b, Lo-74].

A (6.11) neutroncsatornájában az  $\varepsilon_{T_c, T_c - 1} - \varepsilon_{T_c, T_c}$  gerjesztési energia a törzs Coulomb-eltolódási energiája. Az AAS energiája az

$$E_{T_0 - 1, T_0 - 1} \approx E_{T_0, T_0 - 1} - T_0 \langle \phi_p | u_1 | \phi_n \rangle \quad (6.13)$$

összefüggésből becsülhető, amely (6.11)-nek  $i = T_0$ -ra és  $i = (T_0 - 1)$ -re való egyidejű fennállásából következik.

A modell alapegyenleteit (1.13) mintájára úgy állíthatjuk fel, hogy (6.5)-öt és (6.9)-et (6.8)-ba, majd (6.8)-at (1.3)-ba behelyettesítjük, és ezt  $\langle \Phi_{T_0, T_0} \pi(2) |$ -vel,  $\langle \Phi_{T_0, T_0 - 1} v(2) |$ -vel és  $\langle \Phi_{T_0 - 1, T_0 - 1} v(2) |$ -vel rendre megszorozzuk. Ha az igen kicsiny  $(2T_0 - 1)^{\frac{1}{2}} (2T_0)^{-1} (\langle \phi_p^{T_0, T_0 - 1} | v_0 | \phi_p^{T_0, T_0 - 1} \rangle - \langle \phi_n^{T_0, T_0 - 1} | v_0 | \phi_n^{T_0, T_0 - 1} \rangle)$  tagot elhagyjuk, eredményül a következő egyenleteket kapjuk:

$$\begin{aligned} & \left\{ K_{2t} + \left[ u_0 - \frac{2T_0 - 1}{4} u_1 + \langle \phi_n^{T_0, T_0} | v_0 - v'_1 | \phi_n^{T_0, T_0} \rangle + V_c \right] - (E - E_{T_0, T_0}) \right\} \chi_p + \\ & + \left\{ \frac{1}{2(2T_0)^{\frac{1}{2}}} [(2T_0 - 1) u_1 + \langle \phi_n^{T_0, T_0} | v_1 | \phi_p^{T_0, T_0 - 1} \rangle] \right\} \chi_n + \\ & + \left\{ \frac{1}{2} \left( \frac{2T_0 - 1}{2T_0} \right)^{\frac{1}{2}} [-u_1 + \langle \phi_n^{T_0, T_0} | v_1 | \phi_p^{T_0 - 1, T_0 - 1} \rangle] \right\} \chi_n = 0, \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& \left\{ K_{2t} + \left[ u_0 + \frac{(2T_0-1)(T_0-1)}{4T_0} u_1 + \frac{1}{2T_0} (\langle \varphi_p^{T_0, T_0-1} | v_0 - v'_1 | \varphi_p^{T_0, T_0-1} \rangle + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + (2T_0-1) \langle \varphi_n^{T_0, T_0-1} | v_0 + v'_1 | \varphi_n^{T_0, T_0-1} \rangle) \right] - (E - E_{T_0, T_0-1}) \right\} \chi_{\bar{n}} + \\
& \quad + \left\{ \frac{1}{2(2T_0)^{\frac{1}{2}}} [(2T_0-1)u_1 + \langle \varphi_p^{T_0, T_0-1} | v_1 | \varphi_n^{T_0, T_0} \rangle] \right\} \chi_p + \quad (6.14) \\
& + \left\{ \frac{(2T_0-1)^{\frac{1}{2}}}{4T_0} \left[ u_1 - \frac{1}{2} (\langle \varphi_p^{T_0, T_0-1} | v_1 | \varphi_p^{T_0-1, T_0-1} \rangle + \langle \varphi_n^{T_0, T_0-1} | v_1 | \varphi_n^{T_0-1, T_0-1} \rangle) \right] \right\} \chi_{\bar{n}} = 0, \\
& \left\{ K_{2t} + \left[ u_0 + \frac{(2T_0+1)(T_0-1)}{4T_0} u_1 + \frac{1}{2T_0} ((2T_0-1) \langle \varphi_p^{T_0-1, T_0-1} | v_0 - v'_1 | \varphi_p^{T_0-1, T_0-1} \rangle + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \langle \varphi_n^{T_0-1, T_0-1} | v_0 + v'_1 | \varphi_n^{T_0-1, T_0-1} \rangle) \right] - (E - E_{T_0-1, T_0-1}) \right\} \chi_{\bar{n}} + \\
& \quad + \left\{ \frac{1}{2} \left( \frac{2T_0-1}{2T_0} \right)^{\frac{1}{2}} [-u_1 + \langle \varphi_p^{T_0-1, T_0-1} | v_1 | \varphi_n^{T_0, T_0} \rangle] \right\} \chi_p + \\
& + \left\{ \frac{(2T_0-1)^{\frac{1}{2}}}{4T_0} \left[ u_1 - \frac{1}{2} (\langle \varphi_p^{T_0-1, T_0-1} | v_1 | \varphi_p^{T_0, T_0-1} \rangle + \langle \varphi_n^{T_0-1, T_0-1} | v_1 | \varphi_n^{T_0, T_0-1} \rangle) \right] \right\} \chi_{\bar{n}} = 0.
\end{aligned}$$

A modell többi esetére analóg egyenleteket hasonló módon lehet levezetni, azzal a különbséggel, hogy  $t=c-n$ -re és  $c+p$ -re  $t$  antiszimmetriáját explicite figyelembe kell venni, és ezen esetekben az AAS helyett a célmagnak a  $\Phi_{T_0+1, T_0}$  és a  $\Phi_{T_0+1, T_0-1}$  (dupla analóg) állapota gerjesztődik:

$$\Psi = \Phi_{T_0 T_0} \chi_p \pi(2) + \Phi_{T_0, T_0-1} \chi_{\bar{n}} \nu(2) + \Phi_{T_0+1, T_0} \chi_{\bar{p}} \pi(2) + \Phi_{T_0+1, T_0-1} \chi_{\bar{n}} \nu(2). \quad (6.15)$$

Csak a rugalmas és a kvázirugalmas csatornát megtartva, a  $t=c-n$  esetre a

$$\begin{aligned}
& \left\{ K_{2t} + \left[ u_0 - \frac{2T_0+1}{4} u_1 - \langle \varphi_n^{T_0 T_0} | v_0 - v'_1 | \varphi_n^{T_0 T_0} \rangle + V_c \right] - (E - E_{T_0 T_0}) \right\} \chi_p + \\
& \quad + \left\{ \frac{1}{2(2T_0)^{\frac{1}{2}}} [(2T_0+1)u_1 - \langle \varphi_n^{T_0 T_0} | v_1 | \varphi_p^{T_0, T_0-1} \rangle] \right\} \chi_{\bar{n}} = 0, \\
& \left\{ K_{2t} + \left[ u_0 + \frac{(2T_0+1)(T_0-1)}{4T_0} u_1 - \frac{1}{2T_0} (\langle \varphi_p^{T_0, T_0-1} | v_0 - v'_1 | \varphi_p^{T_0, T_0-1} \rangle + \right. \right. \quad (6.16) \\
& \quad \left. \left. + (2T_0-1) \langle \varphi_n^{T_0, T_0-1} | v_0 + v'_1 | \varphi_n^{T_0, T_0-1} \rangle) \right] - (E - E_{T_0, T_0-1}) \right\} \chi_{\bar{n}} + \\
& \quad + \left\{ \frac{1}{2(2T_0)^{\frac{1}{2}}} [(2T_0+1)u_1 - \langle \varphi_p^{T_0, T_0-1} | v_1 | \varphi_n^{T_0, T_0} \rangle] \right\} \chi_p = 0,
\end{aligned}$$

a  $t=c\pm p$  esetre pedig a

$$\begin{aligned} & \left\{ K_{2t} + \left[ u_0 - \frac{2T_0 \pm 1}{4} u_1 \pm \langle \varphi_p^{T_0 T_0} | v_0 + v'_1 | \varphi_p^{T_0 T_0} \rangle + V_C \right] - (E - E_{T_0 T_0}) \right\} \chi_p + \\ & + \left\{ \frac{1}{2(2T_0)^{\frac{1}{2}}} [(2T_0 \pm 1) u_1 \mp \langle \varphi_p^{T_0 T_0} | v_1 | \varphi_n^{T_0, T_0-1} \rangle] \right\} \chi_{\bar{n}} = 0, \\ & \left\{ K_{2t} + \left[ u_0 + \frac{(2T_0 \pm 1)(T_0 - 1)}{4T_0} u_1 \pm \frac{1}{2T_0} ((2T_0 - 1) \langle \varphi_p^{T_0, T_0-1} | v_0 - v'_1 | \varphi_p^{T_0, T_0-1} \rangle + \right. \right. \\ & \left. \left. + \langle \varphi_n^{T_0, T_0-1} | v_0 + v'_1 | \varphi_n^{T_0, T_0-1} \rangle) \right] - (E - E_{T_0, T_0-1}) \right\} \chi_{\bar{n}} + \\ & + \left\{ \frac{1}{2(2T_0)^{\frac{1}{2}}} [(2T_0 \pm 1) u_1 \mp \langle \varphi_n^{T_0, T_0-1} | v_1 | \varphi_p^{T_0 T_0} \rangle] \right\} \chi_p = 0 \end{aligned} \quad (6.17)$$

egyenleteket nyerjük, olyan  $\varphi$  függvényekkel, amelyek (6.7) mintájú egy vagy (6.11)-szerű kétszatornás sajátérték-problémák megoldásai. [A (6.16) levezetése a Függelékben található.]

Ha a  $c$  önkonjugált, a  $V_{\bar{n}p}$  egybeesik a kvázielasztikus szórás közönséges mikroszkopikus modelljének egy speciális esetével. Másrészt, ha a törzs fölötti kvázirészecske járulékat a többiével egyenlőnek tételezzük fel, a makroszkopikus és a mikroszkopikus tagok egybeolvashatók. Ha ugyanis az összes  $\varphi$ -t azonosnak vesszük, és feltesszük, hogy

$$\begin{aligned} u_0(t) &= u_0(c) + \langle \varphi | v_0 | \varphi \rangle, \\ u_1(t) &= \langle \varphi | v_1 | \varphi \rangle, \end{aligned} \quad (6.18)$$

akkor a harmadik egyenlet (és a negyedik is, ha van) lecsatolódik, és az első kettő a  $t+2$  rendszer Lane-egyenleteibe megy át. Ez természetes is, hiszen a félmikroszkopikus modell éppen abban pontosabb a Lane-modellnél, hogy a zárt törzs fölötti kvázirészecskének megengedi, hogy egyénien viselkedjék.

## 6. §. 2. A modell gyakorlati alkalmazása

A potenciálmátrix-elemek mikroszkopikus tagjaira a (3.9) sorfejtésből a (3.12–13) megszorítások következnek, az  $i=1$ ,  $I=j_1$  és a  $J \neq L$  feltétellel módosítva. Tekintve, hogy a diagonális potenciálokban a nem nulla multipólusú „deformált” tagok nagy gömbszimmetrikus tagokhoz adódnak, ott elhanyagoljuk őket.

A  $V(1, c)$  Lane-potenciál az 1-es részecske szeparációs energiáján, a  $V(2, c)$  pedig a lövedék energiáján értendő. Az előbbi kívül esik azon a tartományon, amelyen a Lane-potenciál tulajdonságait eddig tárgyaltuk. Negatív energián  $V(1, c)$  valós. Az IAR-k pozitív energiájú tartományában ugyan komplex volna [Bo-66, Gy-76], de ha a komplex potenciálban szétkenődött rezonanciát egyetlen diszkrét valós energiájú állapottal akarjuk reprezentálni, mint itt is tesszük, arra csak valós



Lane-egyenletek megoldása alkalmas ([Lo-74] és a 8. §). Ezért a  $V(1, c)$ -t minden esetben valósnak tekintettük. Geometriai paramétereit  $\text{Re } V(2, c)$ -ével azonosnak, de  $U_1$ -et felületi alakúnak, erősségét pedig 27 MeV-nek választottuk [Co-69],  $V_0$ -t pedig a kísérleti szeparációs energiákhoz adjusztáltuk. Úgy találtuk egyébként, hogy rögzített szeparációs energia mellett az eredmény alig érzékeny  $V(1, c)$  paramétereire.

A rezonáns  $\varphi_p$ -ket a valós Lane-egyenletek egy-egy szórási megoldásának [Ju-77] választottuk, azon az energián, amely a rezonancia alakját egy Breit—Wigner-formulában — szintén illesztett szélesség és háttér mellett — a legjobban reprodukálja [Lo-74]. A  $\varphi_p$ -t a magon kívüli első csomópontig normáltuk 1-re [Gy-71b], és a  $\langle \varphi_p | v_1 | \varphi_p \rangle$  típusú tagok farokrészének oszcillációit a  $\varphi_p$  ezen kívüli részének levágásával küszöböltük ki. Ez a recept megbízható közelítés megalapozott módszerekhez ([Co-70, Ba-73] és a 8. §). Amely esetekben  $\varphi_p$  kötött, a (6.11)-beli csatolást elhanyagoltuk.

Mivel a (6.14, 6.16—17) egyenletekhez a DWBA pontos közelítés (1,5%-os pontosságú a  $^{91}\text{Zr}(p, \bar{n})$ -re és 5%-os a  $^{91}\text{Zr}(p, \bar{n})$ -re) mindvégig azt használtuk. DWBA-ban a modell elvi nehézség nélkül átfogalmazható az 1 és 2 közti antiszimmetria betartásával. Az a tény azonban, hogy az  $A_{\text{dir}}$  direkt és az  $A_{\text{ex}}$  kicserélődési amplitúdó közötti fáziskülönbség igen csekély, és  $A_{\text{ex}}/A_{\text{dir}}$  szögfüggetlen (3. §. 2.), a pályától és az átadott impulzusmomentumtól való függése pedig jól ismert [At-68, At-70], lényeges technikai egyszerűsítésre ad lehetőséget. Felhasználva, hogy  $\eta_L = 1 + (A_{\text{ex}}/A_{\text{dir}})_L$  eleve ismert, a kicserélődési hatást úgy vettük tekintetbe, hogy  $A_{\text{dir}} + A_{\text{ex}}$  helyett minden  $L$ -re  $\eta_L A_{\text{dir}}$ -t számítottuk.

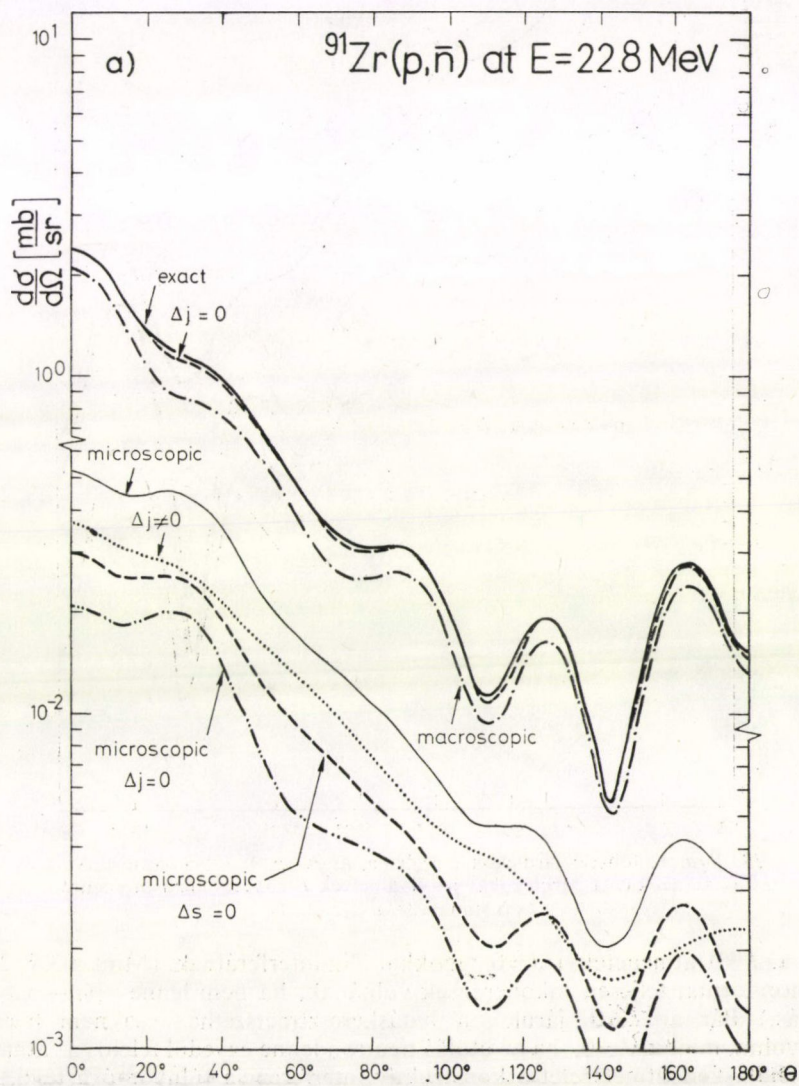
Hogy a CLZ Lane-potenciált alkalmazhassuk, az energiát  $E_p = 22,8$  MeV-nek választottuk. A nukleon—nukleon erőt Yukawa-alakúnak tételeztük fel  $\mu = 1$  fm sugárral és (MeV-ben)  $v_{00} = -30$  [Au-72],  $v_{10} = 19$  ([Do-75] és a 2. ábra),  $v_{01} = 0$  (ha  $v_{01} \neq 0$ , csak a diagonális tagokhoz adódna csekélyke járulék) és  $v_{11} = 12$  [Au-72] erősséggel. Ez a parametrizálás azonban ütközik a Lane-potenciáléval, hiszen ez a  $V(1, 2)$  valós, holott  $u$  komplex. Egy valós  $V(1, 2)$  alkalmazása annak felel meg, hogy a szomszédos magok potenciálmátrixainak képzetes részét egyenlőnek vesszük. Minél kisebb a mikroszkopikus csatolás a makroszkopikushoz képest, annál jobb ez a közelítés. Erre való tekintettel, a  $^{91}\text{Zr}$  esetében az imént megadott valós  $V(1, 2)$ -t használtuk, annál is inkább, mert ez a mikroszkopikus modellben éppen a  $^{90}\text{Zr}$ -t illeszti (2. ábra), a  $^{25}\text{Mg}$  és  $^{27}\text{Al}(p, \bar{n})$  esetében azonban  $V(1, 2)$ -t  $\text{Im } u$ -val összeférő képzetes résszel egészítettük ki. Ezt azzal a kikötéssel nyertük, hogy a potenciálmátrix makroszkopikus és mikroszkopikus tagokból összetett elemeinek képzetes részei a Lane-modell (1.15), (3.4) előírásainak engedelmeskedjenek.

### 6. §. 3. $A^{91}\text{Zr}+p$ rendszer vizsgálata

A  $^{91}\text{Zr}$ -et azért szemeltük ki, mert a modell feltételeit nagyon jól kielégíti: a  $^{90}\text{Zr}$  neutronhéja zárt [Ve-66], és egy  $2d_{5/2}$  neutron a  $^{91}\text{Zr}$ -ből közel egységnyi spektroszkópiai faktorral csíphető fel [Co-63, Sc-69b, Ma-71]. Ezen a példán összehasonlítjuk a különféle csatoló tagok járulékát, és ezzel megpróbáljuk megjósolni, hogy milyen esetben várható eltérés a Lane-modelltől, ha csupán azt az implicit feltevését vetjük el, hogy a különböző pályák járuléka azonos.

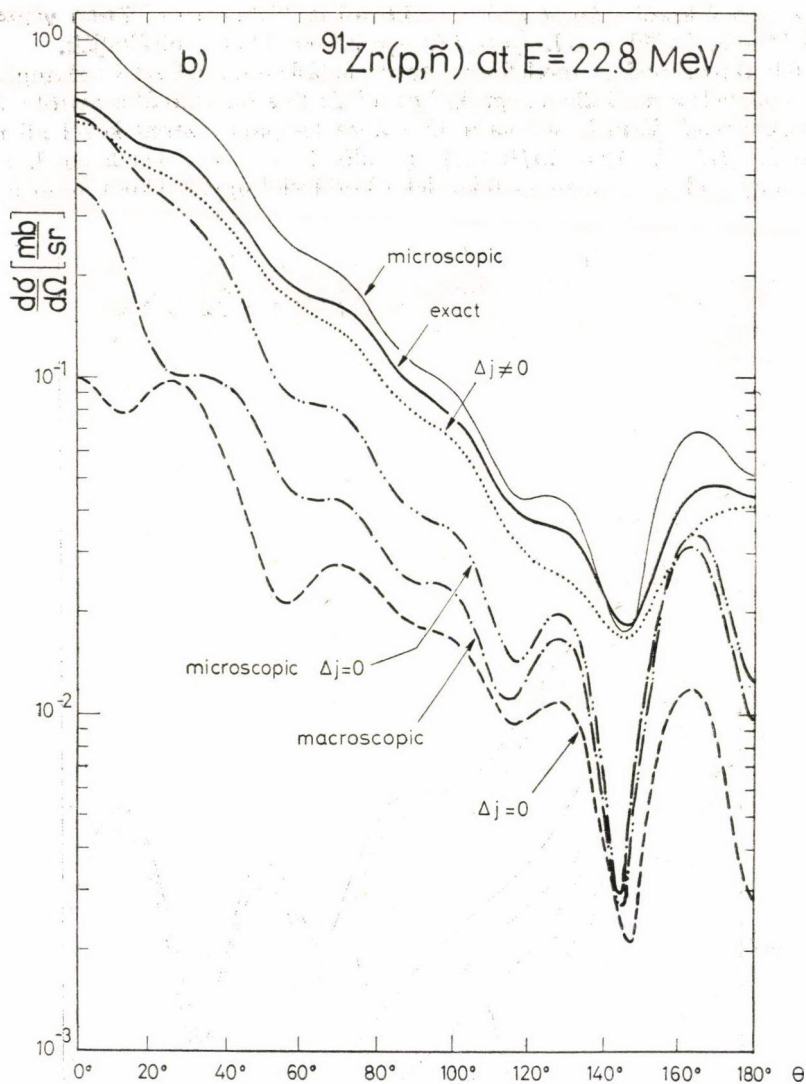
A kicserélődésről számot adó  $\eta$  faktorokat  $^{118}\text{Sn}$ -on és  $^{90}\text{Zr}$ -en végzett számítások [At-68, At-70]  $\eta_0=1$ ,  $\eta_2=1,7$  és  $\eta_4=2,1$  értékben szolgáltatják.

A félmikroszkopikus modellben kapott hatáskeresztmetszet összhangban van a Lane-moddellel: a modellben „egzakt” és a  $^{90}\text{Zr}$  törzsön való átmenettől származó „makroszkopikus” járulék aránya a 13.a ábra tanúsága szerint közel állandó, és kb.  $(N-Z)^2/(N-Z-1)^2=121/100$ -zal egyenlő. Ez annak a két ténynek a folyománya, hogy a plusz neutron  $J=0$  járuléka körülbelül ugyanakkora, mint a többié,



13. ábra

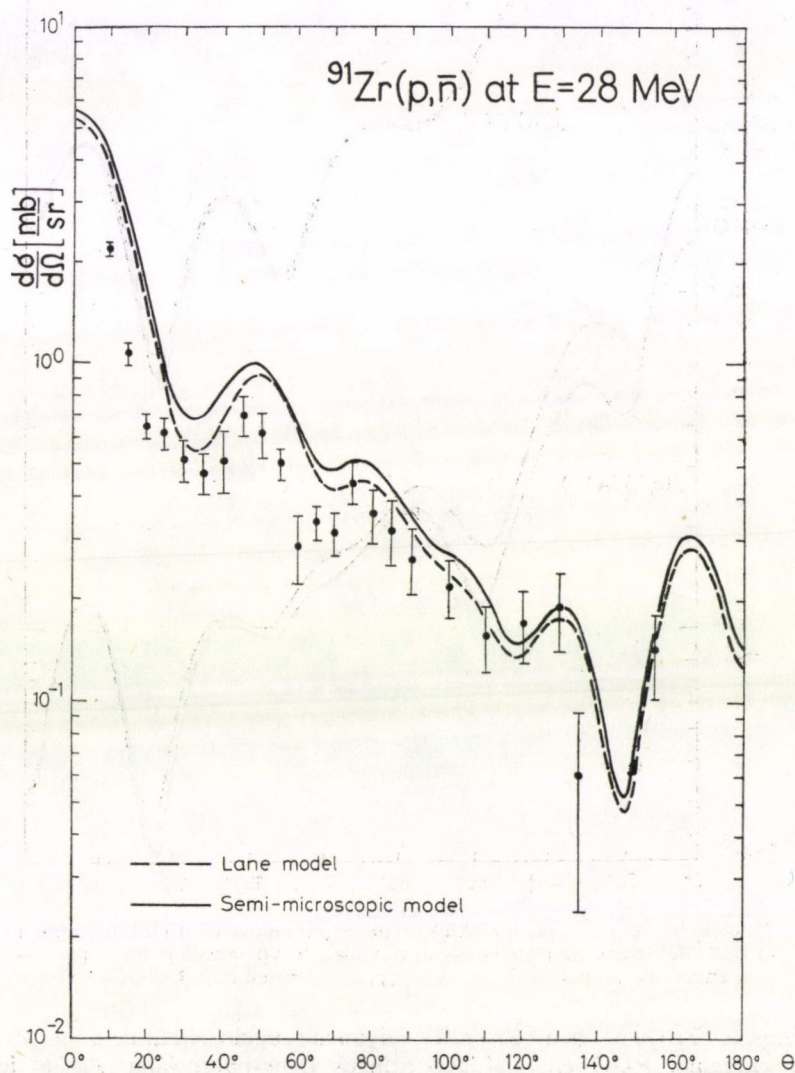




13. ábra. Különböző járulékok a  $^{91}\text{Zr}(p, \bar{n})$  és  $(p, \bar{n})$  folyamathoz. A  $\Delta j$  és a  $\Delta s$  azokat a járulékokat jelöli, amelyek  $J$  teljes impulzusmomentum- és  $S$  spinátadása  $\Delta j$ , ill.  $\Delta s$

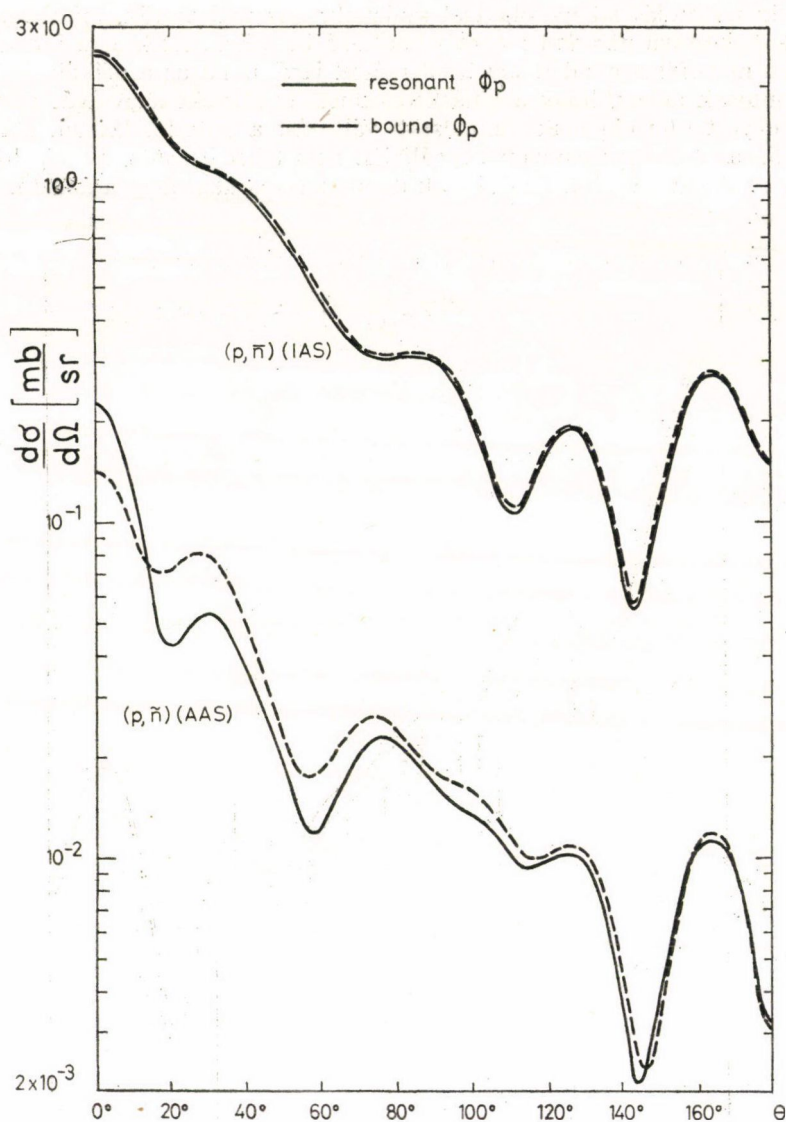
és hogy a  $J \neq 0$  átmenetek a  $J = 0$  tagokkal alig interferálnak. (Mint a 3. §. 2. pontjában mondtuk, teljesen inkoherensek volnának, ha nem lenne spin—pálya kölcsönhatás.) Bár a  $J \neq 0$  járulékok a hatáskeresztmetszethez csaknem háromszor akkora volna, mint a  $J = 0$ , ha az utolsó neutron lenne egyedül felelős az átmenetért, a  $J = 0$  hatáskeresztmetszetet a konstruktív interferencia túlnyomóvá teszi, hacsak a neutrontöbblet nem kicsiny. A 13.a ábrán azok az eredmények, amelyek a mak-

rozkopikus csatolás kikapcsolásával születtek, úgy tekinthetők, mint egy tipikus ( $N=Z+1$ ) könnyű páratlan magra vonatkozó becslések. Ezek arra intenek, hogy a könnyű magokban mind a spinátbillentéssel járó, mind az a nélküli  $J \neq 0$  járulékok fontosak ahhoz, hogy a hatáskeresztmetszet korrekt nagyságát megkapjuk, jóllehet együtt sem okoznak különösebb változást a szögeloszlásban. Ha viszont  $N-Z \geq 5$ , a  $J \neq 0$  mechanizmus egyáltalán nem lehet jelentős, és  $U_1$  bármilyen komolyabb ingadozása [pl. Gr-75] csak dinamikai okokkal magyarázható.



14. ábra. Kísérleti [Du-71] és elméleti szögeloszlások a globális energiafüggő Lane-potenciállal [Pa-76]





15. ábra. Modellszámolás 4,67 MeV-nyire a protonküszöb fölött (folytonos) és 0,01 MeV-nyire az alatt (szaggatott vonal) fekvő végállapotra impulzusmomentum-átadás nélkül vivő  $(p, \bar{n})$  és  $(p, \bar{n})$  átmenetek hatáskeresztmetszetére

Sajnos, a  $^{90}\text{Zr}$   $(p, \bar{n})$  és a  $^{91}\text{Zr}$   $(p, \bar{n})$  folyamat szögeloszlását nem mérték ugyanazon az energián. PDG energiafüggő átlagos Lane-potenciálja [Pa-76] jól leírja a  $^{91}\text{Zr}$  28 MeV-nél mért szögeloszlását [Du-71], akár külön kezeljük az utolsó neutron, akár nem (14. ábra). A hatáskeresztmetszetet viszont, amelyet a vég-

állapot protonbomlásához normáltak, mindkettő 60%-kal túlbecsüli. A  $^{90}\text{Zr}$  ( $p, \bar{n}$ ) hagyományosan [Do-75] és a  $^{91}\text{Zr}$  ( $p, \bar{n}$ ) másodlagos protonbomlással [Du-71] meghatározott integrált hatáskeresztmetszete között a Lane-modell megszabta arányosságtól pontosan ugyanilyen mértékű eltérés van 25 és 35 MeV-nél is. Így igen valószínű, hogy ezt a diszkrepanciát az abszolút hatáskeresztmetszet eme mérési módszerének a 3. §. 4. pontjában is említett bizonytalansága [Cr-72, Gr-73a, Wo-74] okozza.

A ( $p, \bar{n}$ ) hatáskeresztmetszetben (13.b ábra) a  $J=0$  tagok erős kioltódása miatt valóban az impulzusmomentum-átadó tagok vannak túlsúlyban. Az eredmény a mikroszkopikus tag pontos alakjára is érzékeny. A  $J \neq 0$  tagok elhanyagolásával megvizsgáltuk, hogy ha a végállapot rezonancia, milyen hibát okoz a ( $p, \bar{n}$ ) hatáskeresztmetszetben az az elterjedt közelítés, hogy a rezonancia-hullámfüggvényt egy gyengén ( $\varepsilon = -0,01$  MeV) kötött állapothoz tartozó hullámfüggvénnyel helyettesítik. Igaz, a  $^{91}\text{Nb}$ -ben a felhasadt AAS centruma  $E_{T_0-1, T_0-1} - \varepsilon_{T_0, T_0} = -1,07$  MeV-nyire kötött [Vo-69], ám fragmentumai ennek is kilógnak a kontinuumba. Hogy e próba a ( $p, \bar{n}$ )-nel összehasonlítható legyen, a hipotetikus rezonáns AAS-ról feltettük, hogy energiája ugyanannyival van a protonküszöb fölött, mint az IAR-é ( $E_{T_0, T_0-1} - \varepsilon_{T_0, T_0} = 4,675$  MeV [Kr-71]). A 15. ábra mutatja, hogy egyes szögeknél csaknem 100%-os eltérés van a rezonáns és a kötött  $\varphi_p$ -vel számolt ( $p, \bar{n}$ ) hatáskeresztmetszetek között, míg ( $p, \bar{n}$ )-ben ez a különbség — egy korábbi vizsgálattal [Co-72] összhangban — mindössze 5%.

Érzéketlensége a törzs járulékára és érzékenysége a mikroszkopikus tagra a ( $p, \bar{n}$ ) átmenetet alkalmassá teszi arra, hogy vele az AAS-nak töredékein való spektroszkópai eloszlását vizsgáljuk, hacsak ez a modell alkalmazható. Egy ilyen célú analízisben tényleges szeparációs energiájával minden állapot-töredék külön AAS-ként kezelendő, s így a spektroszkópai erősség marad az egyetlen illesztendő és ezzel meghatározható paraméter.

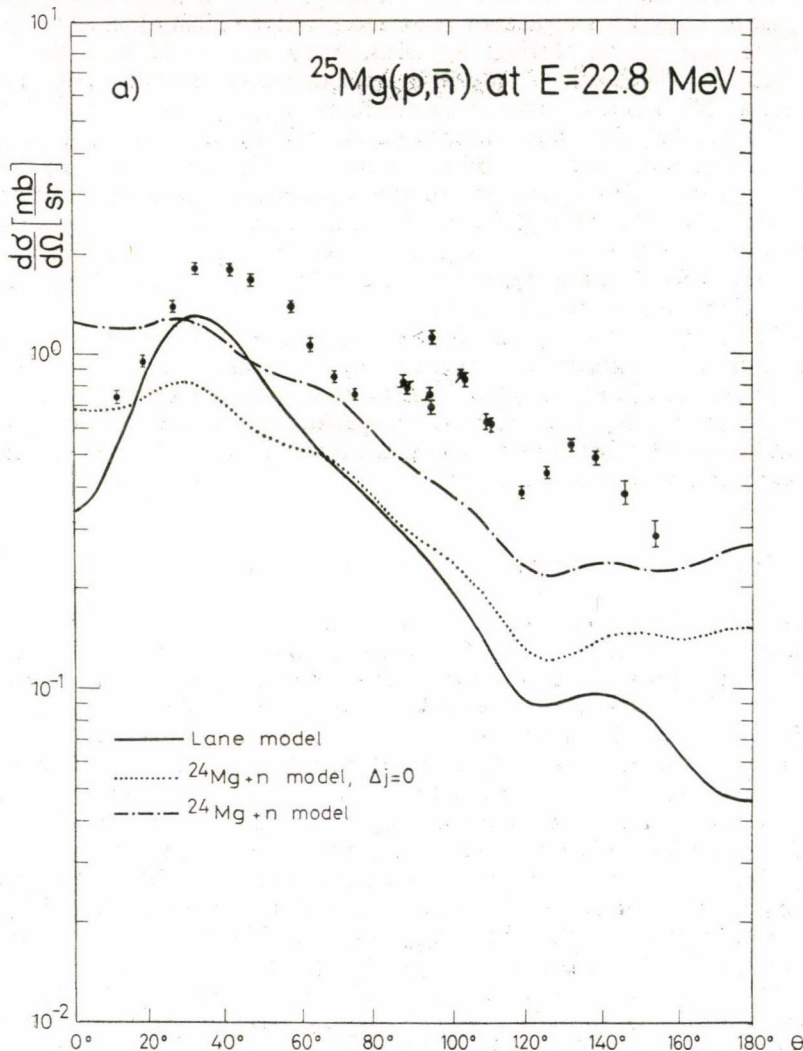
#### 6. §. 4. A $^{25}\text{Mg}$ ( $p, \bar{n}$ ) és az $^{27}\text{Al}$ ( $p, \bar{n}$ ) szórás vizsgálata

Az előző pont ama következtetése, hogy páratlan tömegszámú könnyű magok leírására a Lane-modell nem való, Carlson és szerzőtársai [Ca-75] kísérleti észleleteivel (4. ábra) egybevág. Most megkíséreljük, hogy a  $^{25}\text{Mg}$  ( $p, \bar{n}$ ) és az  $^{27}\text{Al}$  ( $p, \bar{n}$ ) méréseket a félmikroszkopikus modell keretében interpretáljuk. Választásunk azért esett rájuk, mert modellünkben ezek kapcsolatba hozhatók a normálisan viselkedő Lane-potenciállal rendelkező  $^{26}\text{Mg}$ -on mért adatokkal (4. ábra és [Ca-75]). Bár a  $^{26}\text{Mg}$  protonhéja nem zárt, a modell alkalmazása nem rossz közelítés. Nukleon-átadó reakciók ugyanis azt mutatják, hogy az  $^{27}\text{Al}$  alapállapota jól ( $\sim 80\%$ -os pontossággal) leírható akár mint egy  $1d_{5/2}$  protonlyuk a zárt  $^{28}\text{Si}$  törzsön, akár mint egy  $1d_{5/2}$  proton a  $^{26}\text{Mg}$  törzshöz csatolva [Al-69], a  $^{25}\text{Mg}$  pedig ugyanilyen pontossággal a  $^{24}\text{Mg}$  plusz egy  $1d_{5/2}$  neutron kombinációjaként fogható fel [Me-75]. Kísértő volna a  $^{25}\text{Mg}$ -öt  $^{26}\text{Mg}$ -beli  $1d_{5/2}$  neutronlyukként is értelmezni, csak hogy ha ez helyes lenne, akkor az  $N_{v1d5/2} (^{26}\text{Mg}) = 5$  betöltésszám-érték [Al-69]  $N_{v1d5/2} (^{25}\text{Mg}) = 4$ -et vonna maga után, ez viszont ellentmond a  $^{25}\text{Mg}$  ( $d, p$ )  $^{26}\text{Mg}$  reakció összegzési szabályának [pl. En-77], mely  $N_{v1d5/2} (^{25}\text{Mg}) \equiv 5$ -öt ad. Mindezeket a becsléseket a héjmodellszámítások is támogatják [Me-76]. Így a  $^{25}\text{Mg} = ^{24}\text{Mg} + n$ ,  $^{27}\text{Al} = ^{26}\text{Mg} + p$  és az  $^{27}\text{Al} = ^{28}\text{Si} - p$  modell alkalmazására szorítkozunk.

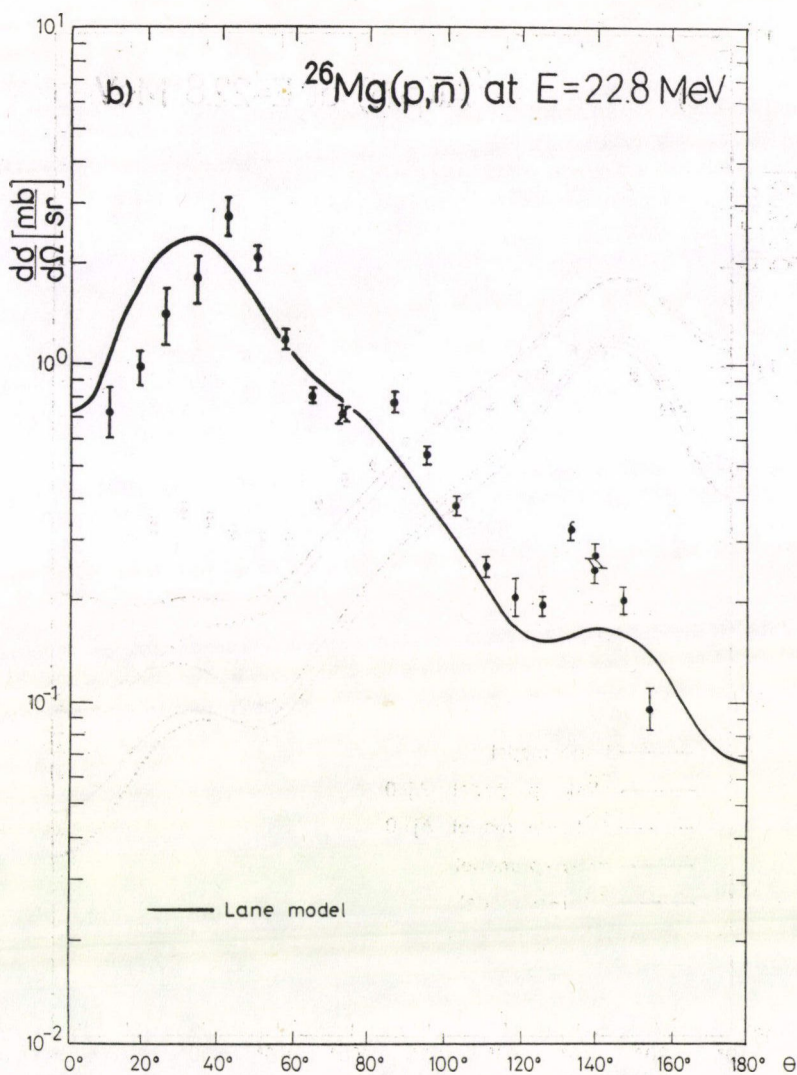


Az  $\eta_0=1$ ,  $\eta_2=1,5$ ,  $\eta_4=1,8$   $1d$  kicserélődési faktorok meghatározásakor Atkinson és Madsen [At-68, At-70] táblázatából azzal a feltevéssel extrapoláltunk, hogy azoknak a  $\sigma_{\text{ex}}/\sigma_{\text{dir}}$  értékeknek az aránya, amelyek csak főkvantumszámban különböző átmenetekhez tartoznak, nem függ a pályamomentumtól. Az eredményeket a 16. ábrán mutatjuk be.

A  $^{26}\text{Mg}+p$  és a  $^{28}\text{Si}-p$  modell eredményei szépen egybeesnek, s ez arra mutat, hogy összeillő makroszkopikus és mikroszkopikus potenciálokat választottunk. A  $^{26}\text{Mg}(p, \bar{n})$ -hez talált [Ca-75] Lane-potenciál a  $^{25}\text{Mg}(p, \bar{n})$  és az  $^{27}\text{Al}(p, \bar{n})$  hatáskeresztmetszetnek sem a nagyságát, sem a lejtését nem reprodukálja, a fél-



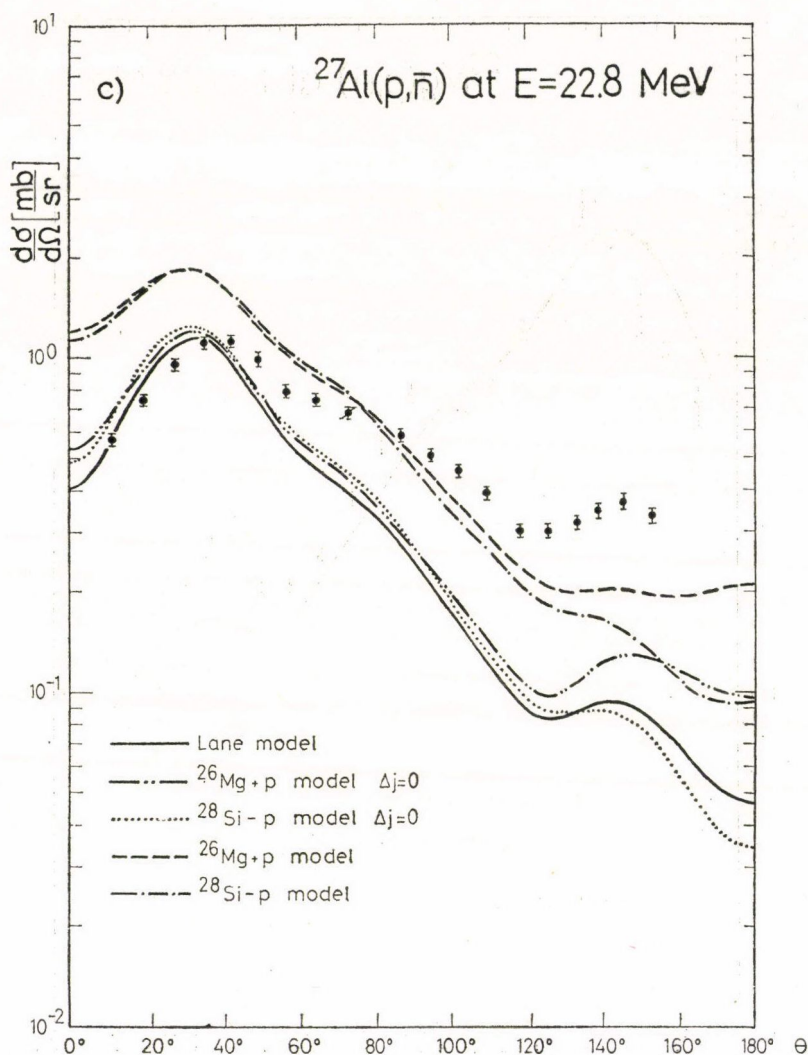
16. ábra



16. ábra

mikroszkopikus modellben viszont a nagyság és a  $^{26}\text{Mg}$  esetén a lejtés is helyes. Mint látható, a  $J \neq 0$  járulékok elengedhetetlenek ahhoz, hogy a korrekt nagyságot megkapjuk, de ezek sem segítenek az alaki egyezés javításában. Az elméleti görbék túl simák, mert a csatolás képzetes részét a  $^{26}\text{Mg}(p, \bar{n})$ -hez illesztett  $\sqrt{T_0}/2 \text{ Im } u_1$ -gyel azonosítottuk, annak ellenére, hogy az ilyen  $u_1$  abszolút fázisa bizonytalan (4. §. 3.). Próbaszámolások arra utalnak, hogy egy olyan  $\text{Im } u_1$  használata, amelyet mikroszkopikusan is értelmes, felületen csúcsosodó (3. ábra)  $\text{Re } u_1$ -gyel együtt illesztettünk a  $^{26}\text{Mg}(p, \bar{n})$  kísérlethez, ezt a tökéletlenséget minden bizonnyal kiküszöböli.





16. ábra. A  $^{25}\text{Mg}(p, \bar{n})$ , a  $^{26}\text{Mg}(p, \bar{n})$  és az  $^{27}\text{Al}(p, \bar{n})$  hatáskeresztmetszet [Ca-75] leírása a  $^{26}\text{Mg}$  Lane-potenciáljával [Ca-75] és a félmikroszkopikus modellekkel

Az  $^{27}\text{Al}(p, \bar{n})$  elméleti szögeloszlásának helytelen lejtése már komolyabb probléma. Ezt nem lehet megszüntetni sem az alapállapotú konfiguráció teljessé tételével, sem  $V(1, 2)$  mérsékelt megváltoztatásával; a  $V(1, 2)$  megváltoztatása,  $\eta_L$  pontosabb meghatározása vagy egy tenzorérő  $v_1$ -be való beiktatása mindössze azt jelenti, hogy némelyik  $J \neq 0$  tagot kiemeljük vagy elnyomjuk, ami a szögeloszlás számára közömbös. Ezen eltérésnek az okát az *Amos* és *Geramb* egyik munkájával [Am-74] való összehasonlítás fedi fel. Az ő direkt  $^{27}\text{Al}(p, \bar{n})$  hatáskeresztmetszetük nagyon hasonlít ahhoz, amit a mi modelljeink adnak. Mi több, ők megmutatták,

hogy egy versengő törzspolarizációs mechanizmushoz való csatolás megválasztható úgy, hogy ez az  $^{27}\text{Al}(p, \bar{n})$  hatáskeresztmetszetet pontosan abban az irányban és mértékben változtassa meg, amely nekünk is szükséges, hogy görbénk az adatokhoz simuljon. Ez a mechanizmus az összetett rendszer ( $E_x = 33,5$  MeV) multipólus óriás-rezonanciájának kialakulása és az  $\bar{n}$ -csatornába történő elbomlása. Eredményük a mienkkel összehasonlítva azt implikálja, hogy sem a  $^{28}\text{Si}-p$ , sem a  $^{26}\text{Mg}+p$  modell nem ad erről a mechanizmusról még burkoltan sem számot. Az nyilvánvaló, hogy a  $V(1, 2)$  nem foglal ilyen hatásokat magában, hiszen magasabb energián határozták meg. Abból azonban, hogy  $u_1$  sem tartalmazza őket, az is következik, hogy e hatások a  $^{26}\text{Mg}(p, \bar{n})$  folyamatban még ezen az energián ( $E_x = 28$  MeV) sem jelentkeznek, és amint a  $^{25}\text{Mg}(p, \bar{n})$ -beli egyezés jelzi, ugyanez vonatkozik erre az esetre is ( $E_x = 30$  MeV).

E szomszédos magok eltérő viselkedése az összetett rendszer páros-páratlan töltésszáma közötti különbséggel magyarázható. Egy statisztikai faktor miatt, mely páros protonszámra a kialakult párok bozonos sajátosságai folytán egészen másképp viselkedik, mint páratlanra [de-63], a dipólus rezonancia alapállapotra bomlásának valószínűsége 0,42-ről 0,05-re csökken a  $^{28}\text{Si}$  és az  $^{27}\text{Al}$  között [Ts-74]. Ugyanez a tényező hat arra is, ahogyan a rezonancia ebben a csatornában kialakul és neutron-kibocsátással az IAS-ra elbomlik.

#### 6. §. 5. Statikus és dinamikus hatások

A félmikroszkopikus modellel szomszédos magoknak az átlagos Lane-modelltől mutatott eltérését analizáltuk. Feltételeztük, hogy a lövedéknek mind a törzsszel, mind a különálló nukleonnal való kölcsönhatása alkalmas a törzsön végbemenő  $(p, \bar{n})$  szórás leírására. Ebben a modellben ilyen kölcsönhatás mellett a különálló kvázirészecske egyéni viselkedése csak abban állhat, hogy sajátosságos térbeli alakú skaláris és  $J \neq 0$  impulzusmomentum átadását okozó tenzoriális tagokkal járul hozzá a potenciálmátrixhoz. Pontosan ez a két hatás felelős a  $(p, \bar{n})$  (AAS) átmenetekért. A skaláris tagok egyedisége csak ezen átmenetekben hat számottevően, a tenzoriális tagok viszont páratlan tömegszámú könnyű magokon végbemenő  $(p, \bar{n})$  (IAS) szórásban is jelentősek. A félmikroszkopikus modell segítségével könnyű megbecsülni, hogy ezek a hatások mekkora ingadozásokat okozhatnak a Lane-modell-analízissal meghatározott  $U_1$ -ben. Ha az (1.6) egyenleteket elfogadjuk, akkor  $U_1$  ennél erősebb ingadozásait (1.10) értelmében csak  $v_1$ -re háríthatjuk át. Ám a G-mátrix-erő közel magfüggetlen lokális nukleon—nukleon kölcsönhatással helyettesíthető, így  $v_1$  kiugró szabálytalanságai közvetve az (1.6)-ot érvénytelenítő törzsgerjesztési mechanizmus jelenlétét jelzik. Mivel a legerősebb  $(p, d; d, \bar{n})$  átmenetekben a törzs nem gerjesztődik, s ezzel összhangban, a  $(p, d; d, \bar{n})$  mechanizmus fellépte a kölcsönhatás állandóságát nem zárja ki (5. §), ezért ha a kísérletből meghatározott kölcsönhatás ingadozik, ezt valószínűleg más mechanizmus okozza. Két példában, a Mo-izotópokéban [Gr-75, Ma-76] és az  $^{27}\text{Al}$ -ében valóban bebizonyították, hogy az átlagos kölcsönhatástól való eltérésért a törzs gerjesztései (kollektív inelasztikus és óriásrezonancia-hatások) felelősek. Az  $^{27}\text{Al}(p, \bar{n})$  esetében a félmikroszkopikus modell alátámasztja azt a feltevést, hogy törzsgerjesztési mechanizmus van jelen, de  $^{25}\text{Mg}(p, \bar{n})$ -re és  $^{26}\text{Mg}(p, \bar{n})$ -re az ellenkezőjét mutatja. Mint-hogy ez a különbség az összetett rendszer töltésszámának páros-páratlan mivoltában talál magyarázatot, ilyenfajta anomália fellelhető nehezebb magokban is.



#### IV. TÖLTÉSCSERE DEUTERONLEFOSZTÓ REAKCIÓKBAN ÉS A $(d, \bar{n})$ KÜSZÖBHATÁS

##### 7. §. Csatolt csatornás modellek a küszöbhatás leírására

Az előző fejezetekben bepillantást nyertünk a nukleon és a mag töltéscserélő kölcsönhatásának viselkedésébe, amint az rugalmas és kvázirugalmas nukleon-szórásban mutatja magát. E vizsgálatoknak van egy önmagukon túlmutató céljuk: ezeken keresztül érthetők meg a bonyolultabb nukleáris rendszerek ütközésében fellépő töltéscserélő hatások. Ezek a hatások legkönnyebben az egyrészecske-átadó folyamatokban érthetők tetten és vezethetők vissza a nukleon és mag töltéscseréjére. Minthogy a részecsketranszferre egy lényegében makroszkopikus leírásmód a gyümölcsöző, e hagyományos elmélet közvetlen általánosításaként a töltéscsere makroszkopikus megközelítéséből kell merítenünk.

Nem célunk azonban ennek a még nyitott területnek olyan mélységű bemutatása sem, mint a nukleonszórásé volt. Egyetlen szűkebb problémához, a  $(d, \bar{n})$  küszöbhatáshoz kívánunk csupán hozzányúlni, mégpedig olyan eszközökkel, amelyek kifejlesztése a 2. és a 6. §-ban leírt módszerek birtokában nem jelent új technikai nehézséget. Ez előtt a deuteronlefosztó reakciókban talált töltéscsere-hatásokat mindössze azért tekintjük át, mert a későbbiekben levezetendő modell alkalmas legtöbbnek a leírására.

##### 7. §. 1. A töltéscsere hatása lefosztó reakciókban

A nukleon és a mag közötti töltéscserélő kölcsönhatás jelenlétével a transzfer reakciók hagyományos DWBA-elmélete nem törődik. Ezt szemléltetendő tekintsük a  $c$  célmag (6.6)-ban definiált  $\Xi_{T_c T_c}$  alapállapotából a  $t$  végmag akármelyik,  $T_0 T_0 \left( T_0 = T_c + \frac{1}{2} \right)$  izospinú  $\Phi_{T_0 T_0}$  állapotában  $S$  spektroszkópiai súllyal jelenlevő  $\varphi_n^{T_0 T_0}$  egyrészecske-állapotba való beugrást jelentő  $(d, p)$  folyamatot és a  $\Phi_{T_0 T_0}$  analogonjára,  $\Phi_{T_0, T_0-1}$ -re  $\varphi_p^{T_0, T_0-1}$ -en keresztül vivő  $(d, \bar{n})$  átmenetet. A (2.19) átmeneti mátrixelemek a hagyományos DWBA-ban

$$\mathcal{T}_{dp} = \langle \chi_p^{(-)} \Phi_{T_0 T_0} | v_{np} | \Xi_{T_c T_c} Q \chi_d^{(+)} \rangle = S^{\frac{1}{2}} \langle \chi_p^{(-)} \varphi_n^{T_0 T_0} | v_{np} | Q \chi_d^{(+)} \rangle \quad (7.1)$$

$$\mathcal{T}_{d\bar{n}} = \langle \chi_n^{(-)} \Phi_{T_0, T_0-1} | v_{np} | \Xi_{T_c T_c} Q \chi_d^{(+)} \rangle = -\hat{T}_c^{-1} S^{\frac{1}{2}} \langle \chi_n^{(-)} \varphi_p^{T_0, T_0-1} | v_{np} | Q \chi_d^{(+)} \rangle$$

alakúak, ahol  $v_{np}$  a neutron—proton kölcsönhatás,  $Q$  a deuteron belső hullámfüggvényének izospintól független tényezője:

$$(K_{12} + V_{12} - \varepsilon_d) Q \frac{1}{\sqrt{2}} [v(1) \pi(2) - \pi(1) v(2)] = 0, \quad (7.2)$$



a torzított hullámok pedig a

$$[K_{dc} + u_d + V_C - (E - \varepsilon_d - \varepsilon_{T_c T_c})] \chi_d^{(+)} = 0, \quad (7.3)$$

$$[K_{2t} + u_p + V_C - (E - E_{T_0 T_0})] \chi_p^{(-)} = 0, \quad (7.4)$$

$$[K_{2t} + u_{\bar{n}} - (E - E_{T_0, T_0-1})] \chi_{\bar{n}}^{(-)} = 0 \quad (7.5)$$

egyenletek megfelelő (2. §) határfeltételű megoldásai. Ezen elméletben közömbös, hogy  $u_p$  és  $u_{\bar{n}}$  mögé odaképzelnünk-e egy (3.21) típusú relációt, hiszen itt  $u_1$ -nek nincs semmi szerepe. Legnaivabb formájában e modell ráadásul a  $\varphi_p^{T_0, T_0-1} = \varphi_n^{T_0 T_0}$  közelítést is alkalmazza, vagyis a Coulomb-hatásokat a formafaktorban elhanyagolja.

Így nem csoda, hogy a DWBA-tól számos olyan eltérést tapasztaltak, amely a Coulomb-hatások és a töltéscsere figyelembevételének szükségességét sürgette. A Coulomb-hatások  $E_{T_0, T_0-1}$ -et mintegy  $\Delta E_C$ -vel megnövelik az  $E_{T_0 T_0}$ -hoz képest, s ez kb. az  $A=60$ -as tömegszámotól kezdve elég ahhoz, hogy  $\varphi_p^{T_0, T_0-1}$ -et kiemeljék a kontinuumba. Pontosan ez a nehézség indított több szerzót a  $\varphi_p^{T_0, T_0-1} = \varphi_n^{T_0 T_0}$  és egyéb (lásd alább) problematikus közelítésekre. Töltéscsere a befogott részecske és a célmag között, de az eltávozott részecske és a maradékmag között is végbe-mehet. Az elsőnek nyilvánvalóan a formafaktorban, a másodiknak a torzított hullámban kell érződnie. A töltéscsere átmenetet hoz létre a  $p$ -csatornából az  $\bar{n}$ -csatornába és viszont.

Mint a (7.1) mutatja, az egymással analóg állapotok azonos kvantumszámú spektroszkópiai faktoraik azonosak. Az analízisekben jelentkező legszembetűnőbb anomália az, hogy ezek erősen különbözöknek adódnak. A Coulomb-hatások elhanyagolása akkor vezet a legdrasztikusabb hibákhoz, ha  $\varphi_p^{T_0, T_0-1}$  a kontinuumban van. Ezek kiküszöbölésének módszereit egy korábbi munkánk részletesen tárgyalja [Lo-73]. Mind a könnyű [Si-66], mind a nehezebb [Ko-72] magokon megfigyeltek azonban további spektroszkópiai anomáliákat, amelyeket a töltéscserélő csatolással sikerült nagyrészt kiküszöbölni [Co-73c]. Sőt, olyan csatolási effektusokat is felfedeztek, amelyek kizárólag a teljes izospin megmaradásának megsértésével léphetnek fel [Ha-67].

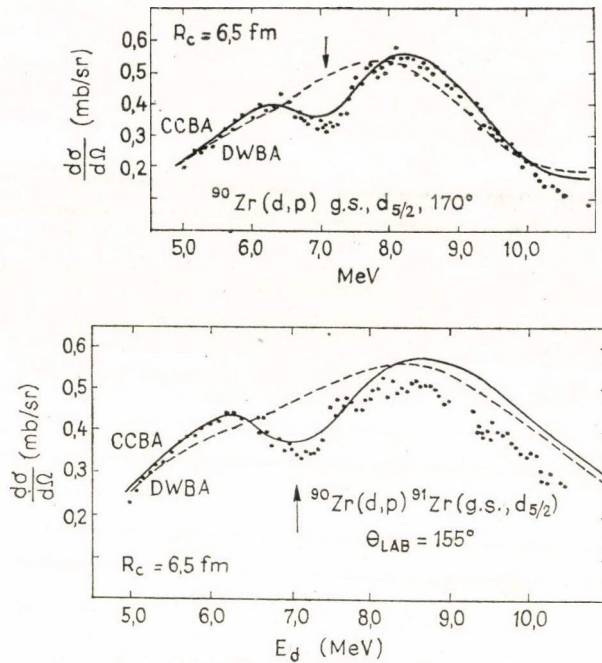
Talán részrehajlás nélkül állíthatjuk azonban, hogy a részecskeátadásban a töltéscserével kapcsolatos legizgalmasabb jelenség a  $(d, \bar{n})$  küszöbhatás. Ezt az  $A \approx 90$ -es tömegszámhoz közeli magokon a  $(d, p)$  folyamat hátsó szögű gerjesztési függvényeiben [Mo-66] és analízálóképességében [Gr-73b] figyelték meg. A hatáskeresztmetszetben fellépő effektus jellegzetes 0,5–1 MeV szélességű horpadásból vagy egyéb alakú törésből áll (17. ábra). A továbbiakban csak erre összpontosítunk.

## 7. §. 2. Korábbi modellek és kritikájuk

A küszöbhatás magyarázatára Zaidi és Brentano [Za-66] a DWBA-t úgy módosította, hogy a torzított nukleonhullámok (7.4–5) optikaimodell-egyenletét a  $t+2$  rendszerre vonatkozó (1.13) Lane-egyenletekkel helyettesítette. Módszerük tehát a 2. §-ban említett CCBA speciális esete. Ezzel a feltevéssel a  $c(d, 2)t$  folyamat átmeneti mátrixelemére a

$$\mathcal{T}_{d2} = S^{\frac{1}{2}} [\langle \chi_p^{(-)} \varphi_n^{T_0 T_0} | v_{np} | \varphi_d^{(+)} \rangle - \hat{T}_c^{-1} \langle \chi_{\bar{n}}^{(-)} \varphi_p^{T_0, T_0-1} | v_{np} | \varphi_d^{(+)} \rangle] \quad (7.6)$$





17. ábra. A  $^{90}\text{Zr}(d,p)$  folyamatban az  $\bar{n}$ -küszöbnél (nyíl) fel-lépő anomália leírása CCBA-val (folytonos) a DWBA (szag-gatott vonal) eredményével összehasonlításban [Co-69]. Az  $R_c$  jelentésére lásd a 8. §-t

képletet kapjuk, ahol  $\chi_p^{(-)}$  és  $\chi_n^{(-)}$  a Lane-egyenletek olyan megoldása, amely  $(d,p)$ -re a befutó gömbhullámok mellett a  $\chi_p^{(-)}$ -ban,  $(d,\bar{n})$ -re pedig a  $\chi_n^{(-)}$ -ban tartalmaz síkhullámot [vö. (2.14–15)]. E módszert Tamura és Watson [Ta-67], majd részletesen kifejtve Coker és Tamura ([Co-69], a továbbiakban: CT) alkalmazta a  $^{90}\text{Zr}(d,p)$  és  $(d,\bar{n})$  leírására, s az ő tárgyalásuk nyomán több további analízist is végeztek [pl. Co-71, Ho-72b, Za-73]. CT számításai jól reprodukálták az adatokat (17. ábra), de erősen vitatható önkény árán, mely az egész modell érvényét kérdéssé teszi. Eredményeik nyugtalanító vonásairól a következő §-ban szólnunk; most csak a probléma gyökerére mutatunk rá. Az önkény  $\varphi_p^{T_0, T_0-1}$  megválasztásában áll, és abból ered, hogy a Zaidi–Brentano-moddal ad hoc módon csak az eltávozó részecske és a végmag között vezet be a töltéscserélő potenciálfüggést, és így némi szabadságot enged meg  $\varphi_p^{T_0, T_0-1}$  meghatározásában.

E hiányosságot korán felismerve, Zimányi és Gyarmati a deuteronlefosztó reakció DWBA-elméletét alapjaiból vezette le újra a részt vevő három fragmentum között szimmetrikusan páronként működő töltéscsere feltételezésével [Zi-68b]. Hamilton-operátoruk a (6.1) képletével azonos, hiszen a 6. §-ban mi is ugyanebből a kölcsönhatásból indultunk ki. Levezetésük a (7.6)-tal azonos formájú T-mátrix-elemet eredményezett, azonban  $\varphi_p^{T_0, T_0-1}$  most már egyértelműen meghatározott, mégpedig a  $c+1$  rendszer Lane-egyenleteinek [nálunk (6.11–12)] a rezonáns protonmegoldása lett.

Ám az ő levezetésük is bírálatot kapott. *Hooper* [Ho-69] rámutatott, hogy  $\Phi_{T_0, T_0-1}$  és  $\Phi_{T_0-1, T_0-1}$  helyett a két határozatlan izospinű állapotot,  $\Xi_{T_c T_c} \varphi_p \pi(1)$ -et és  $\Xi_{T_c, T_c-1} \varphi_n \nu(1)$ -et kezelték úgy, mint a végmag független állapotait, és a hozzájuk tartozó „torzított hullámok”-ban közelítéseket vezettek be, melyek ennél fogva megalapozatlanok. Azonban azok az egyenletek, amelyeket *Hooper* vezetett le, fizikai határfeltétellel megoldhatatlanok, mert bennük a neutroncsatornák közötti csatolás végtelen hatótávolságú. Ilyen esetben ugyanis az aszimptotikus tartományban (2.4) nem megoldás, s így szórási amplitúdót és hatáskeresztmetszetet nincs mihez hozzárendelni. *Hooper* levezetését megismételtük, és kiderült, hogy a végtelenbeli csatolás nem fizikai okból származik. (A modell hallgatólág felteszi, hogy az IAR diszkrét állapot, és a  $(d, \bar{n})$  folyamat lezajlása után sokkal, attól függetlenül bomlik, így a háromtest-problémát kéttest-problémára vezeti vissza.) A végtelenbeli csatolást egy rossz helyen és fölöslegesen alkalmazott elhanyagolás okozza [Ho-69 (18b) egyenlete], mely ahhoz fogható, mintha a (6.11)-ből nyerhető

$$\begin{aligned}
 (E_{i, T_0-1} - \varepsilon_{T_c, T_c-1}) \langle \hat{\phi}_n^{i, T_0-1} | \hat{\phi}_n^{i, T_0-1} \rangle &= \left\langle \hat{\phi}_n^{i, T_0-1} \left| K_{1c} + u_0 + \frac{2T_0-3}{4} u_1 \right| \hat{\phi}_n^{i, T_0-1} \right\rangle + \\
 &+ \frac{(2T_0-1)^2}{2} \langle \hat{\phi}_n^{i, T_0-1} | u_1 | \hat{\phi}_p^{i, T_0-1} \rangle
 \end{aligned} \quad (7.7)$$

egyenlet jobb oldalának második tagját elhagynánk.

### 7. §. 3. A félmikroszkopikus modell deuteronlefosztó reakcióra

Most bemutatjuk e modell korrekt levezetését. Ahelyett azonban, hogy *Zimányi* és *Gyarmati* vagy *Hooper* nyomán haladnánk, sokkal egyszerűbben célhoz érünk egy másik úton, ha támaszkodunk a 6. §. 1. pontjának eredményeire.

Hogy a T-mátrixelem képletét (2.19) mintájára írassuk fel, a valószínű  $\mathcal{H}$  Hamilton-operátort mindkét fragmentációra (1.4)-, majd (2.12)-szerűen, tehát

$$\mathcal{H} = H_0(b) + K_b + u'_b + \tilde{u}_b \quad (7.8)$$

alakban fel kell bontanunk:

$$\mathcal{H} = H_0(d) + K_{dc} + V(d, c) + \tilde{u}_d \equiv [H_c + (K_{12} + V_{12})] + K_{dc} + V(d, c) + [V_{1c} + V_{2c} - V(d, c)], \quad (7.9)$$

$$\mathcal{H} = H_0(2) + K_{2t} + V(2, t) + \tilde{u}_2 \equiv [H_c + (K_{1c} + V_{1c})] + K_{2t} + V(2, t) + [V_{2c} + V_{12} - V(2, t)].$$

Az argumentummal ellátott potenciátagok — a 6. § jelöléseivel összhangban — modell-potenciálok, az indexesek pedig valószínű kölcsönhatásokat jelölnek.



A 2. §  $\Phi_a \chi_a^{(+)}$  függvényének megfelelő  $X_d^{(+)}$  hullámot a

$$[H_0(d) + K_{dc} + V(d, c) - E] X_d^{(+)} = 0 \quad (7.10)$$

egyenlet megoldása adja, amely

$$X_d^{(+)} = \Xi_{T_c T_c} \varrho(1, 2) \frac{1}{\sqrt{2}} [v(1) \pi(2) - \pi(1) v(2)] \chi_d^{(+)} \quad (7.11)$$

szerint felbontható, tényezőit pedig (6.6), (7.2) és  $V(d, c) = u_d + V_c$  révén (7.3) határozza meg.

A kimenő csatornák egymásra hatását (csatolását) akarjuk leírni, ezért a

$$[H_0(2) + K_{2t} + V(2, t) - E] X_2^{(-)} = 0 \quad (7.12)$$

egyenletnek eleget tevő  $X_2^{(-)}$ -t (2.1) mintájára sorba fejtjük. Hogy könnyen jussunk előbbre, a DWBA-számítások általános gyakorlatához idomulva úgy képzeljük, hogy a nukleon egyrészezske-pályára ugrik be, azaz feltételezzük, hogy a  $c+1$  rendszer ezen állapotban való leírása szempontjából  $V_{1c}$  egy  $V(1, c)$  egyrészezske-potenciállal helyettesíthető. Ámde akkor a (7.12)-ben szereplő Hamilton-operátor a félmikroszkopikus modellével azonos formájú:

$$H_0(2) + K_{2t} + V(2, t) \approx H_c + K_{1c} + V(1, c) + K_{2t} + V(2, t) \equiv H. \quad (7.13)$$

Mivel e modellben valamely  $\Phi_{T_0 T_0}$ -al együtt (amely nem okvetlenül az alapállapot) éppen  $\Phi_{T_0, T_0-1}$  és  $\Phi_{T_0-1, T_0-1}$  gerjeszthető,  $X_2^{(-)}$  (6.8) formájú, és komponenseinek  $\chi^{(-)}$  együttható-függvényeire a (6.14) egyenlet teljesül,  $(-)$  határfeltétellel.

Hogy a T-mátrixelem (2.19) képletében ténylegesen számítható egyszerű kifejezést kapjunk, a (7.9)-ben levő  $\tilde{u}_2 = V_{2c} + V_{12} - V(2, t)$  maradék-kölcsönhatást átalakítjuk. Bevezetve a  $P = |X_2^{(-)}\rangle \langle X_2^{(-)}|$ ,  $Q = |X_d^{(+)}\rangle \langle X_d^{(+)}|$  és az  $R = 1 - P - Q$  projekciós operátorokat, amelyek a csatornák hipotetikus ortogonalitása miatt páronként ortogonálisak ( $PQ=0$ -ból  $PR=0$ ,  $QR=0$  is következik),  $V_{12}$ -t

$$\begin{aligned} V_{12} &= (P + Q + R) V_{12} (P + Q + R) = P V_{12} P + Q V_{12} Q + (R V_{12} + V_{12} R) \equiv \\ &\equiv V(1, 2) + \tilde{V}(1, 2) + V_R(1, 2) \end{aligned} \quad (7.14)$$

módon bonthatjuk fel. (A második egyenlőségben még  $Q V_{12} = V_{12} Q$  fennállását is kihasználtuk, mely igaz, ha a csatornák nem a deuteron belső hullámfüggvénye miatt ortogonálisak:  $\langle X_2^{(-)} | \Xi_{T_c T_c} \chi_d^{(+)} \rangle = 0$ .) A  $P$  és a  $Q$  definíciójából világos, hogy a jobb oldal első tagja a csupasz kétnukleon-kölcsönhatásnak a nukleon-csatornában ható komponense (az ottani effektív erő), a második tagja pedig a deuteron kötésében működik. Modellterünkben  $PR \equiv |X_2^{(-)}\rangle \langle X_2^{(-)} | R = 0$  és  $QR \equiv |X_d^{(+)}\rangle \langle X_d^{(+)} | R = 0$  miatt  $V_R(1, 2)$  nem ad járulékot, ezért elhagyjuk. Így a (6.2)-ből és a (7.14)-ből  $V_{2c} = V(2, c)$  közelítésben

$$\tilde{u}_2 = \tilde{V}(1, 2) \quad (7.15)$$

következik. A (2.19)-be  $X_2^{(-)}$  (6.8) képletét, a (7.11)-et és (7.15)-öt behelyettesítve és feltételezve, hogy  $\tilde{V}(1, 2) = \tilde{v}_0(1, 2) + \tilde{v}_1(1, 2) \hat{i}_1 \cdot \hat{i}_2$ , továbbá a brában az 1 és

2 között elhanyagolt antiszimmetriát egy  $\sqrt{2}$ -es statisztikai faktorial figyelembe véve, a

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{d2} = & \langle \chi_p^{(-)} \varphi_n^{T_0 T_0} | v_{np} | \varrho \chi_d^{(+)} \rangle - \hat{T}_c^{-1} [\langle \chi_{\bar{n}}^{(-)} \varphi_p^{T_0, T_0-1} | v_{np} | \varrho \chi_d^{(+)} \rangle + \\ & + (2T_c)^{\frac{1}{2}} \langle \chi_{\bar{n}}^{(-)} \varphi_p^{T_0-1, T_0-1} | v_{np} | \varrho \chi_d^{(+)} \rangle] \quad (2 = p, \bar{n}, \bar{n}) \end{aligned} \quad (7.16)$$

formulát nyerjük, amelyben  $v_{np} = \tilde{v}_0 - \frac{3}{4} \tilde{v}_1$ . Pl. a  $\mathcal{T}_{dp}$ -ben a három tag a direkt járulékot, a  $(d, \bar{n})$  plusz töltéscsere és a  $(d, \bar{n})$  plusz töltéscsere folyamatának a járulékát jelenti.

Az  $\bar{n}$ - és az  $\bar{n}$ -küszöb közötti (6.13)-ban megadott nagy különbség miatt az antianalóg átmenet hatásától származó tag nem járul hozzá az  $\bar{n}$ -küszöb anomáliájához. Ezért a (6.14) egyenletekben a (6.18) közelítés bevezetése ésszerű; ez az egyenleteket visszaviszi a  $t+2$  rendszer

$$\left[ K_{2t} + u_0 - \frac{T_0}{2} u_1 + V_C - (E - E_{T_0 T_0}) \right] \chi_p^{(-)} + \sqrt{\frac{T_0}{2}} u_1 \chi_{\bar{n}}^{(-)} = 0, \quad (7.17)$$

$$\left[ K_{2t} + u_0 + \frac{T_0-1}{2} u_1 - (E - E_{T_0, T_0-1}) \right] \chi_{\bar{n}}^{(-)} + \sqrt{\frac{T_0}{2}} u_1 \chi_p^{(-)} = 0$$

Lane-egyenleteibe, és a (7.16)-ból az antianalóg tagot eltüntet. Miután a (7.17) Lane-egyenletek paramétereit a  $t$  magon való szóráshoz illeszthetjük, nem jelent következetlenséget, ha — továbbra is a DWBA szabványos gondolatmenetét követve [Sa-64b] — feloldjuk azt a feltevést, hogy  $\Phi_{T_0 T_0}$  (6.5) alakú. Ha feltételezzük, hogy (6.5) jobb oldala  $\Phi_{T_0 T_0}$ -nak csak egy komponense, annak 1-nél kisebb súlya

lesz. Ha ráadásul az antiszimmetriát is tekintetbe vesszük, a  $\mathcal{T}_{d2}$  új tényezője az  $S^{\frac{1}{2}}$  spektroszkópiai amplitúdó lesz, s ezzel  $\mathcal{T}_{d2}$  a (7.6) formát ölti.

A (7.16) modell egyszerű, plauzibilis izospinformalizmusbeli általánosítása a deuteronlefosztó reakciók közösleges DWBA-modelljének. Nem nehéz belátni, hogy hasonló gondolatmenettel egyéb egyszerű nukleonátadó reakciók DWBA-modellje is általánosítható. E modell minden olyan izospincsolási hatás vizsgálatára alkalmas, amely a partíciók közötti nukleáris kölcsönhatás izospinmegőrző jellegének feltételezésével összefér. Bár lényegesen egyszerűbb, mint a *Cotanch* és *Robson* által e célra kifejlesztett formalizmus [Co-73c], teljesítőképessége gyakorlati problémákra meggyőződésünk szerint nem kisebb.

A továbbiak szempontjából az fontos, hogy a  $(d, \bar{n})$  küszöbhatás leírására specializált CCBA  $\mathcal{T}_{d2}$  átmeneti mátrixelemét (7.6) adja. Ebben a deuteronfüggvényt (7.2), a deuteron torzított hullámát (7.3) és fizikai  $[(+)-os]$  peremfeltételek határozzák meg, a nukleon torzított hullámait pedig (7.17) olyan határfeltételű megoldása adja, amely aszimptotikusan  $2=p$  esetén a befutó gömbhullámok mellett  $\chi_p^{(-)}$ -ban,  $2=\bar{n}$  esetén  $\chi_{\bar{n}}^{(-)}$ -ban tartalmaz síkhullámot. A  $\varphi_n^{T_0 T_0}$  egyrészecske-függvényt (6.7) kötött állapoti, a  $\varphi_p^{T_0, T_0-1}$  IAR-függvényt pedig (6.12)-n keresztül (6.11) rezonáns megoldása szolgáltatja. Ez az eredmény — anélkül, hogy hozzá bármilyen nem nyilvánvalóan jogos közelítést kellett volna tennünk — lényegében azonos *Zimányi* és *Gyarmati* [Zi-68b] eredményével.



A CCBA-modell forrástag-módszerbeli ekvivalensét a (2.20—21) recept szerint nyerjük:

$$\begin{aligned}
 & [K_{dc} + u_d + V_c - (E - \varepsilon_d - \varepsilon_{T_c T_c})] \chi_d^{(+)} = 0, \\
 & \left[ K_{2t} + u_0 - \frac{T_0}{2} u_1 + V_c - (E - E_{T_0 T_0}) \right] \psi_p^{(+)} + \sqrt{\frac{T_0}{2}} u_1 \psi_{\bar{n}}^{(+)} = -S^{\frac{1}{2}} \langle \varphi_n^{T_0 T_0} | v_{np} | Q \rangle \chi_d^{(+)}, \\
 & \left[ K_{2t} + u_0 + \frac{T_0 - 1}{2} u_1 - (E - E_{T_0, T_0 - 1}) \right] \psi_{\bar{n}}^{(+)} + \sqrt{\frac{T_0}{2}} u_1 \psi_p^{(+)} = \\
 & = (2T_0)^{-\frac{1}{2}} S^{\frac{1}{2}} \langle \varphi_p^{T_0, T_0 - 1} | v_{np} | Q \rangle \chi_d^{(+)}.
 \end{aligned} \tag{7.18}$$

Ebből az átmeneti mátrix elemeit (2.4) mintájára közvetlenül a megoldások aszimptotikus paramétereiből nyerjük.

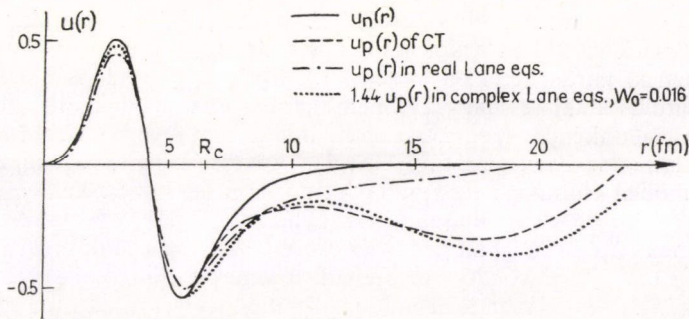
### 8. §. A $^{90}\text{Zr}(d, p)$ és $(d, \bar{n})$ reakció leírása a $\bar{n}$ -küszöb környékén

Az előző §-ban rávilágítottunk arra, hogy a deuteronlefosztó reakció  $p - \bar{n}$  csatolási modelljének eddig használt változata [Co-69] formális okokból revízióra szorul, s ezt végre is hajtottuk. Ez a lépés azonban talán üres pedantériának tűnnék föl, ha az intuitív modellel végzett kiértékelések nem erősítenék az elvi alapokkal szemben táplált kételyünket.

#### 8. §. 1. A korábbi analízisek sajátosságai

A  $\varphi_p^{T_0, T_0 - 1}$ -et CT egy belső tartományon  $\varphi_p^{T_0 T_0}$ -al veszi egyenlőnek, és — hogy számot adjon az IAR rezonáns jellegéről — azon kívül az  $E_{T_0, T_0 - 1} - \varepsilon_{T_c T_c}$  energiájú  $F$  és  $G$  Coulomb-függvények egy valós kombinációjának választja. A külső és a belső tartományon vett függvényt  $F$  és  $G$  keverési arányának megválasztásával egy  $R_c$  sugárnál simán csatlakoztatja, és az  $R_c$ -t illesztendő paraméterként kezeli. Az  $R_c$  értéke az eredményt döntően befolyásolja, hiszen ez határozza meg a formafaktor viselkedését a mag felületén, ahol a direkt reakció nagyrészt lezajlik. Sajnos  $R_c$  értéke esetről esetre szabálytalanul változik, és néha nem nagyobb a magpotenciál hatósugaránál. Mint a 18. ábra a  $^{90}\text{Zr} + p$  esetére mutatja, az  $R_c$  illesztésével nyert  $\varphi_p^{T_0, T_0 - 1}$  általában nem egyezik meg a Lane-egyenletek rezonáns megoldásával. Ez a hullámfüggvény csak egy sokkal nagyobb protonszélességű rezonanciához tartozhatna. (A kísérlet szerint  $\Gamma_p = 3,1$  keV [Kr-71].) Lane [La-70] kimutatta, hogy a küszöbnek a  $p$ -hullámú  $\bar{n}$ -állapotokkal való összjátéka jól számot ad az anomáliáról, feltéve, ha a  $\bar{n}$ -csatornabeli potenciál képzetes része kicsi (1—2 MeV). Éppen ezért elgondolkodtató, hogy CT analízisében  $W_{\bar{n}}^B = 8,1$  MeV.

A felsorolt kétségek arra sarkallnak, hogy ezen eredményeket a  $p - \bar{n}$  csatolási modell szilárdan megalapozott változatával ellenőrizzük. Ezt a feladatot azzal igyekszünk megoldani, hogy a végmag alapállapotára  $2d_{5/2}$ -es átmenettel vezető  $^{90}\text{Zr}(d, p)$  és az analóg  $^{90}\text{Zr}(d, \bar{n})$  folyamatot — az előző §-ban ismertetett módon — újra kiértékeljük.



18. ábra. A  $\varphi_n^{T_0 T_0}$  radiális része (folytonos), CT protonfüggvényének (szaggatott), a valós Lane-egyenlet  $\varphi_p^{T_0, T_0-1}$  megoldásának (pont-vonal) és egy  $W_0=0,016$  MeV erősségű komplex Lane-potenciállal generált  $\varphi_p^{T_0, T_0-1}$ -nek (pontosított vonal) a radiális része ( $\varphi=[u(r)/r]\mathcal{Y}_{1s,j}$ ) a  $^{90}\text{Zr} + \text{nukleon}$  rendszerben

## 8. §. 2. A küszöbhatás javított leírása

Technikai okokból a CCBA helyett a (7.18) forrástag-módszert alkalmaztuk  $\langle \varphi | v_{np} | \varphi \rangle = D_0 \varphi$  nullahatótáv-közelítésben ( $D_0^2 = 1,5 \times 10^4 \text{ MeV}^2 \text{ fm}^3$ ). Sajnos — a háromtest-probléma maradványaként — ebben a skémában is megjelenik a rezonanciaállapotra vezető lefosztó reakciók elméletének divergenciaproblémája. A DWBA-ban és a CCBA-ban az átmeneti mátrixelem lesz divergens integrál [Hu-73, Lo-73], itt pedig a  $\varphi_p^{T_0, T_0-1}$  oszcilláló farka miatt a  $\langle \varphi_p^{T_0, T_0-1} | v_{np} | \varphi \rangle = D_0 \varphi_p^{T_0, T_0-1}$  csatoló potenciál lesz végtelen hatótávú. Hogy a probléma megoldható maradjon, ugyanahhoz az eljáráshoz folyamodunk, mint a 6. §-ban  $\langle \varphi_p | v_0 | \varphi_p \rangle$  kiszámításakor:  $\varphi_p^{T_0, T_0-1}$  farkát a magon kívüli első csomópontnál levágjuk [Co-70]. Ezt a közelítést DWBA-ban ellenőrizték. Úgy találták, hogy pontosságát a rezonancia szélessége határozza meg, s minél keskenyebb a rezonancia, a közelítés annál jobb. Enyhén alábecsüli ugyan a keresztmetszetet, de még egy 100 keV széles rezonancia esetén is egészen elfogadható egyezést adott a differenciális hatáskeresztmetszet DWBA-ban egzakt görbéjével [Ba-73].

Hogy a CT-eredményekkel a mieinket összehasonlíthassuk, az optikai paramétereket — az  $u_n$  variált erősségeit kivéve — a CT-ével azonosnak vettük ([Co-69, Cl-70b]; 5. táblázat). Tehettük ezt annál is inkább, mert  $u_p$  és  $u_d$  a rugalmas

5. TÁBLÁZAT

Potenciálparaméterek

	$V$	$r_0$	$a$	$W_D$	$r_D$	$a_D$	$V_{s.o.}$	$r_{s.o.}$	$a_{s.o.}$	$r_C$
$^{90}\text{Zr} + d$	94,5—1,2 $E_d$	1,28	0,72	15,95	1,39	0,7	0			1,3
$^{91}\text{Zr} + p$	54,6	1,25	0,65	14,8	1,25	0,47	6,8	1,2	0,42	1,25
$^{91}\text{Nb} + \bar{n}$	6. táblázat	1,27	0,66	6. tábl.	1,27	0,47	7,2	1,27	0,66	
$^{90}\text{Zr} + n$	49,835	1,25	0,65	0			6,8	1,2	0,42	
$^{90}\text{Zr} + p$	$V_0 = 51,91$ $V_{1D} = 25$	1,25	0,65	0			6,75	1,2	0,42	1,25



szóráshoz való energiánkénti illesztésből származik [Cl-70b]. A  $^{91}\text{Zr}+p$  rendszer Lane-egyenleteinek csatolása valós és felületi típusú, a protonpotenciállal meg- egyező geometriai paraméterekkel és  $V_{1D}=27$  MeV erősséggel. Bár a küszöbhatás felléptét a csatolás alakja és nagysága nem befolyásolja, az alak illesztésen e paraméterek némileg önkényes megválasztása minden bizonnyal ront. Mivel a potenciálok energiafüggése ilyen alacsony energián kevésbé ismert,  $u_{\bar{n}}$  meghatározásában a Lane-modell előírásai nem nyújtanak támpontot, s ezért kell  $u_{\bar{n}}$ -t magukhoz a  $(d, p)$ — $(d, \bar{n})$  kísérletekhez illeszteni (6. táblázat).

A kísérletekkel összhangban az  $S$  értékétől 0,9-et fogadtunk el [Co-63, Sc-69b, Ma-71],  $\varphi_{p_0}^{T_0 T_0}$ -t a  $V^n$ -re vonatkozó szeparációsenergia-előírással határoztuk meg,  $\varphi_{p_0}^{T_0, T_0^{-1}}$ -et a 6. §. 2. pontjában leírt módon  $V_0$  illesztésével valós Lane-potenciálban számítottuk [Ju-77]. Ez a potenciál az IAR szélességét  $\Gamma=2,7$  keV-et ad, ami egybehangzik a kísérleti protonszélesség  $\Gamma_p=3,1$  keV értékével [Kr-71]. Valós Lane-potenciál használatával az egyéb nyitott csatornák abszorpciós hatását és a háttér- állapotokon való szétkenődést elhanyagoljuk. Komplex Lane-potenciállal meghaladhatnánk ezt a közelítést, de akkor okvetlenül a szórási mátrix pólushelyéhez tartozó Gamow-függvénnyel kell a rezonanciát leírni, mert komplex potenciálban egyetlen szórási határfeltételű függvény sem képviselheti egymagában a rezonancia egészét [Lo-74]. Ezt a Gamow-függvényt azonban jól közelíti a valós Lane-modell valós rezonáns szórási függvénye [Lo-74].

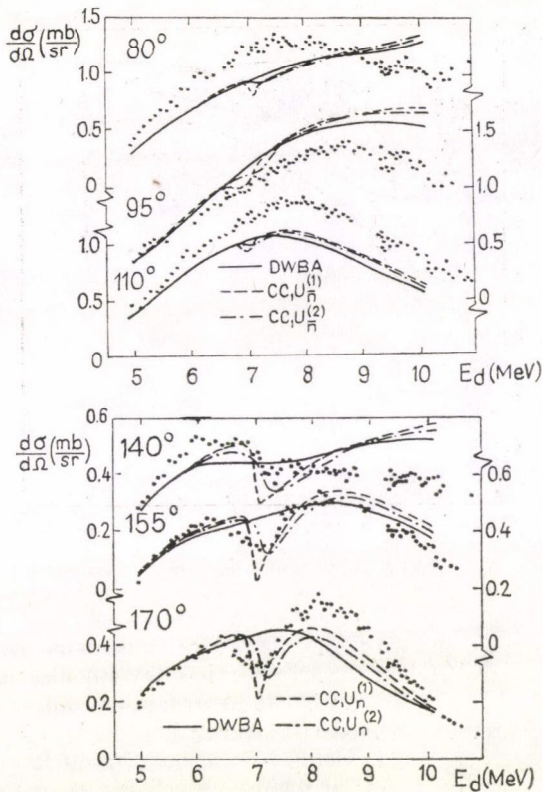
A 19. ábra a  $(d, p)$  gerjesztési függvényt, a 20. pedig az integrált  $(d, \bar{n})$  hatáskeresztmetszetet ábrázolja. Minthogy azt várjuk, hogy a küszöbfeffektust a  $p$ -hullámú  $\bar{n}$ -csatornabeli neutronállapotok és a küszöb egybeesése okozza [Co-69, La-70], nem meglepő, hogy nemcsak a  $(d, \bar{n})$  keresztmetszet, de a  $(d, p)$ -beli anomália is igen érzékeny  $u_{\bar{n}}$ -re. Bár a  $(d, \bar{n})$  keresztmetszetet a protoncsatornához való csatolás nem túlzottan befolyásolja, mégis nehéz volna  $u_{\bar{n}}$ -et DWBA-val pusztán a  $(d, \bar{n})$  adatokhoz illeszteni, mivel ezek nem elég pontosak, és a levágási közelítés csakúgy, mint a nem direkt mechanizmusok elhanyagolása a  $(d, \bar{n})$ -ben inkább érezteti hatását, mint a  $(d, p)$ -ben. Mégsem kíséreltük meg a paramétereket a  $p$ - és az  $\bar{n}$ -csatornában egyszerre optimalizálni, mert a számolások roppantul gépidőigényesek. Számításainkat ehelyett csupán két, sejtéssel kiszemelt neutronpotenciállal,  $u_{\bar{n}}^{(1)}$ -gyel és  $u_{\bar{n}}^{(2)}$ -vel végeztük el (6. táblázat). Így hát összhangot a kísérlettel csupán nagyjából sikerült elérni, ám ily módon egy összehasonlítás a  $p$ -állapotok helyzetével (6. táblázat) a küszöbanomália működését még szemléletesebbé teszi. Nem is várunk további lényeges információt egy módszeres paraméterkereséstől.

## 6. TÁBLÁZAT

Az  $u_{\bar{n}}^{(i)}$   $\bar{n}$ -potenciál  $V_{\bar{n}}^{\bar{n}}$ ,  $W_D^{\bar{n}}$  mélységei és a szórási mátrix  $3p_{3/2}$ ,  $3p_{1/2}$  pólushelyei a  $\text{Re } u_{\bar{n}}^{(i)}$  potenciálban

$i$	$V_{\bar{n}}^{\bar{n}}$	$W_D^{\bar{n}} *$	$E_{\bar{n}}(3p_{3/2})$	$E_{\bar{n}}(3p_{1/2})$
1	50,1	1	-0,02	0,24 - 0,14i
2	49	$2,5 + 0,4E_{\bar{n}}$	$0,12 - 0,005i$	$0,30 - 0,32i$
3	48	$2,5 + 0,4E_{\bar{n}}$	$0,22 - 0,12i$	$0,32 - 0,51i$
4	52	8,1	-0,50	$0,03 - 0,004i$

\* Küszöb alatt  $W_D^{\bar{n}} \rightarrow 0$ .

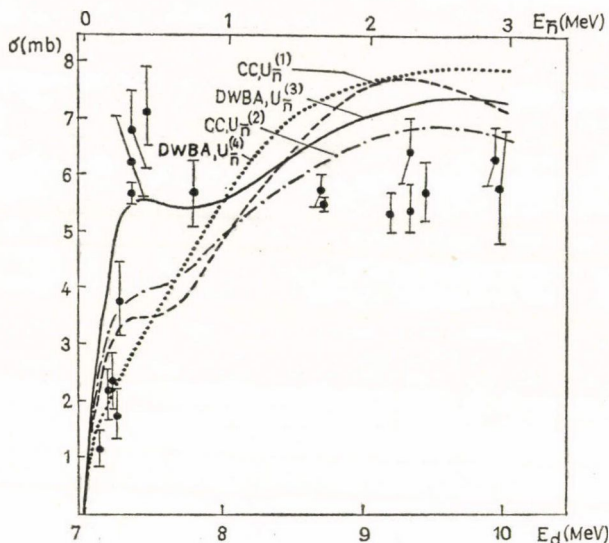


19. ábra. A  $^{90}\text{Zr}(d, p)$  gerjesztési függvény [Cl-70b] és elméleti reprodukciója [a CC a (7.18) modellt jelöli]

Először a  $(d, \bar{n})$  keresztmetszetet elemezzük. Az  $E_{\bar{n}}=0,4$  MeV-nél levő csúcsot sekély potenciálok adják legjobban vissza, melyekben a  $p_{3/2}$  állapot e csúcs közelében van ( $u_{\bar{n}}^{(3)}$ ), de ilyen potenciálok a küszöbmélyedést túl magas energiára csúsztatják el. Olyan potenciálok, amelyek a mélyedést jó helyre teszik, a  $p_{1/2}$  rezonanciának köszönhetőleg adnak egy vállat a  $(d, \bar{n})$  keresztmetszetben is. Mivel az  $u_{\bar{n}}^{(4)}$  CT-potenciál beköti a  $p_{3/2}$  és pontosan a küszöbre helyezi a  $p_{1/2}$  állapotot, a  $(d, \bar{n})$  hatáskeresztmetszetnek sima és kevésbé meredek emelkedést ad. Az illesztések minőségét a  $\chi^2=(1/N) \sum (\sigma_{\text{th}} - \sigma_{\text{exp}})^2 / (\Delta \sigma_{\text{exp}})^2$  függvénnyel mérve,  $\chi^2(1)=36$ ,  $\chi^2(2)=18$  és  $\chi^2(\text{CT})=27$  értékeket kapunk, ahol „CT”-vel a hibrid formafaktoros eredeti számolás eredményét jelöltük [Co-69]. Ezek a nagy  $\chi^2$ -értékek nemcsak az illesztések mérsékelt minőségét, hanem az adatok ingadozó menetét is tükrözik. A CT által elért illesztés semmi esetre sem jobb a miénknél: vizuálisan inkább rosszabbnak tűnik fel, amennyiben görbéjük 0,4 MeV-nél csúcsnak nyomát sem mutatja [Co-69].

Ami a  $(d, p)$  gerjesztési függvényt illeti, kvalitatív sajátosságait mindkét neutron-potenciálunk leírja. Az  $u_{\bar{n}}^{(1)}$  és az  $u_{\bar{n}}^{(2)}$  tagjai közül  $\text{Re } u_{\bar{n}}^{(1)}$  és  $\text{Im } u_{\bar{n}}^{(2)}$  látszik meg-





20. ábra. A  $^{90}\text{Zr}(d, n)$  integrált hatáskeresztmetszet [Cu-68] és elméleti reprodukciója [a CC a (7.18) modellt jelöli]

felelőbbnek; az utóbbi a neutronszórás adatok leírására is megfelel [Be-56]. Az eltérések egy részét a „háttérhez” való pontatlan DWBA-illesztés hordozza. Arra irányuló próbálkozások, hogy  $u_n$ -t a CT-féle neutronpotenciálhoz hasonlóvá tegyük, elrontották az effektust. A mélyedés központjában,  $E_d=7,2$  MeV-nél,  $140^\circ$  és  $170^\circ$  között — egyezően a kísérlettel —  $u_n^{(2)}$   $d\sigma/d\Omega=0,35-0,29$ -et szolgáltat. A  $\text{Re } u_n^{(4)} + i \text{Im } u_n^{(2)}$  ezt egyöntetűen 0,40-re növeli, a  $\text{Re } u_n^{(2)} + i \text{Im } u_n^{(4)}$  0,39-et,  $\text{Re } u_n^{(4)} + i \text{Im } u_n^{(4)}$  pedig  $d\sigma/d\Omega=0,41-0,42$ -t ad eredményül. A CT-féle  $\varphi_p^{T_0, T_0-1}$  függvény  $u_n^{(2)}$ -vel együtt használva 0,38—0,34-et ad  $140^\circ$  és  $170^\circ$  között,  $u_n^{(4)}$  pedig a CT-féle  $\varphi_p^{T_0, T_0-1}$ -gyel körülbelül ugyanarra az eredményre vezet, mint Lane-formafaktorról. Így arra következtethetünk, hogy mind  $u_n^{(4)}$ , mind CT protonfüggvénye felelős az illesztés romlásáért.

### 8. §. 3. A javított leírásmód viszonya a korábbihoz

Számolásaink azt mutatják, hogy csak a  $p_{3/2}$  állapotnak a küszöbvel való egybeesése hozhatja létre a megfigyelt anomáliát, és a  $p_{1/2}$  állapotnak, mely a CT-potenciálban a küszöbön van, csak kisebb a hatása. Másrészről pedig a CT-potenciál erős abszorpciója nagyrészt valóban kiegyengeti a mélyedést. CT küszöbgörbéi [Co-69], melyek élesen ellentmondanak a mi eredményeinknek, csak olyan effektusoknak tulajdoníthatók, amelyeket a mi levágásos közelítésünk elhanyagol. Ilyen hatások létezhetnek, mert a CT-formafaktor egy széles rezonancia hullámfüggvényére emlékeztet, és széles rezonanciák esetén a T-mátrixelemhez a magtól távoli tartományok is hozzájárulhatnak, melyekről a jelen közelítés nem ad számot. Így a két eredmény ellentmondása egyedül nem jogosíthat fel arra, hogy CT eredményeit mint alternatív interpretációt elvessük. Hangsúlyozzuk azonban, hogy az



IAR élettartama három nagyságrenddel nagyobb, mint amennyi idő alatt egy direkt reakció lejátszódik, így az a megállapításunk, hogy CT számítása a jelenséget 20 fm-nél távolabbi tartományok járulékára építve magyarázza, újra azt mutatja, hogy e számítások nem adják a küszöbhatás kielégítő magyarázatát.

Mikroszkopikus IAR-hullámfüggvényét ajánlja Bledsoe és Tamura az IAR-ra vezető lefosztó reakcióban előforduló  $\varphi_p^{T_0, T_0-1}$  függvény gyanánt, és azt várja, hogy ezzel igazolja a CT által használt függvényt [Bl-71]. Azonban egy olyan elméletben, amely a finomszerkezetet vagy a szétkenődést leírja, a hullámfüggvény minden valós energián az IAR-nak csak egy töredékét reprezentálja. Mivel a Bledsoe—Tamura-féle csakúgy, mint a komplex Lane-modell ilyenfajta elmélet, hullámfüggvényeik csak egymással hasonlíthatók össze (és feltehetőleg hasonlíthatnak is), de nem egy valós fenomenologikus hullámfüggvénnyel. Minthogy egy alkalmas komplex Lane-potenciálban vett olyan valós szórási függvény, amelyhez a 17 keV-es korrekt teljes szélesség tartozik [Kr-71], alakra hasonlít a CT-hullámfüggvényre (18. ábra), elképzelhető, hogy a Bledsoe—Tamura-féle is emlékeztet rá, de ez nem igazolja a CT-függvény használatát valós fenomenologikus IAR-protonfüggvény helyett. Egy Bledsoe—Tamura- vagy komplex szórási Lane-függvényt használó  $(d, \bar{n})$  számításban a hatáskeresztmetszetet több, mondjuk  $N$  számú,  $E_{\bar{n}}$  energián kell kiszámítani, s erre integrálni. A  $(d, p)$ -beli anomália vizsgálatába az összes  $\bar{n}$ -fragmentumot egyszerre be kell vonni, tehát  $N$  számú neutroncsatornával kell boldogulni, s ez megoldhatatlannak látszik.

Mégoly meggyőző legyen is, egyetlen példa láttán felmerül a kérdés, hogy bevál-e ez a modell a  $(d, \bar{n})$  küszöbhatás magyarázatára egyéb magokon is. A nukleonátadás azonos kvantumszámaihoz tartozó összes ismert eset beleillik egy Lane-től származó  $Q$ -érték (tehát  $E_n = E_{T_0 T_0} - \varepsilon_{T_c T_c}$ ) szerinti osztályozási rendszerbe [La-70]. Az  $u_{\bar{n}}^{(1)}$ -gyel és az  $u_{\bar{n}}^{(2)}$ -vel végzett és egyéb próbaszámítások is azt mutatják, hogy a küszöbmélyedés alakja mindenekelőtt a  $p$ -állapotok  $E_{\bar{n}}$  energiájától függ. Mivel  $E_n$ -t  $u_n(c)$ ,  $E_{\bar{n}}$ -t pedig  $u_{\bar{n}}(t)$  határozza meg, e szisztematikus viselkedést úgy érthetjük meg, ha a két neutronpotenciál között kapcsolatot tételezünk fel. E völgyek mélysége azonban 0,5—1 MeV-es ingadozásokat mutathat különböző magok között [Ca-76]. Mivel a  $dE_{\bar{n}}/dV^{\bar{n}}$  erősen lecsökken  $E_{\bar{n}}=0$  környezetében ( $R$ -mátrixos szóhasználattal „kompressziós hatás” [La-70]), ezért a küszöb erősen „vonzza” a  $p$ -állapotokat, és a potenciálmélységek 0,5—1 MeV-es ingadozása megengedi, hogy a  $Q$ -érték szerinti szabályosság fennálljon. Így várható, hogy  $u_{\bar{n}}$  minden magra kissé különböző, de egyedi adjusztyálásával a modell érvényes a többi esetre is.

Összefoglalásképp a bemutatott példa alapján annyit mondhatunk, hogy ha a fizikailag értelmetlen protonhullámfüggvényt a  $p-\bar{n}$  csatolási modell szellemében meghatározott függvényre cseréljük, e modell a küszöbhatásra értelmes magyarázatot ad.

## V. ÖSSZEFOGLALÁS

A bemutatott eredményeket minden § végén összefoglaltuk, így most csak az marad hátra, hogy munkánk legáltalánosabb tanulságait levonjuk.

A fenomenologikus Lane-potenciálnak a beiktatása az első elvek és a nukleon—mag szórás kísérletek közé az értelmezés fontos eszköze. A legegyszerűbb nukleon—mag szórás kísérlet és a magfizika számára alapvető nukleon—nukleon kölcsönhatás közé valójában több leírási szint ékelődött (a Lane-potenciál, a fenomenologikus



effektív nukleon—nukleon erő, a G-mátrix és a pozitív energiára a szabad nukleonok kölcsönhatásából számított effektív nukleon—nukleon kölcsönhatás), és ebben a hierarchiában minden fokozatnak helye van. A Lane-potenciál nélkül nehezen boldogulnánk például a töltéscsere bonyolultabb reakciókban való fellejtének leírásában. Aminthogy azonban maga a szabadon ható nukleon—nukleon erő is egyelőre közelítőleg ismert, a hierarchia minden elemének definíciójában is közelítő megfontolások vannak. Ezek érvényét az eggyel mélyebb szint segítségével végső soron a használat dönti el.

A Lane-potenciálról munkánk eredményeképp az derült ki, hogy csak a sok magra képzett átlag értelmében konzisztens fogalom. Ebben az átlagképzésben azonban helye van a  $p-\bar{n}$  töltéscseréért felelős érzékeny  $U_1$  tag egyedi illesztésének, ha olyan megszorítást rovunk ki, mely nem engedi, hogy alakja az átlagos viselkedéstől túlzottan eltávolodjon.

Az ily módon egyedileg illesztett  $U_1$  fluktuációjának okára mikroszkopikus meggondolásokkal felelhetünk, melyek zárt törzsű magok környékén végig is vihetők. A páros-páros magok  $U_1$  aszimmetriapotenciáljában magról magra észlelt változást két példában azokra a héjfluktuációkra sikerült visszavezetni, amelyek a  $(p, \bar{n})$ (AAS) átmenetekért felelősek. A  $(p, \bar{n})$  szórás ingadozása és a  $(p, \bar{n})$  léte közötti kapcsolat lehetővé teszi az utóbbi makroszkopikus eszközökkel való leírását.

A páros és a páratlan magok között a héjingadozást elfedik a páratlan magokon nem nulla  $J$  impulzusmomentum-átadással végbemenő direkt folyamatok, amelyeket a Lane-modell elhanyagol. Ezek könnyű magokon számottevő nagyságúak, és mivel az általuk közel inkoherensen szolgáltatott szögeloszlás kevésbé tér el az impulzusmomentum-átadás nélküli járulékától, a szögeloszlásban sem hívják fel magukra a figyelmet. A bemutatott példák alapján a  $J \neq 0$  átmenet könnyen megbecsülhető, és a  $J=0$ -ban a statikus héjfluktuációk határok közé szoríthatók. A kiértékelésekben talált ennél nagyobb ingadozások a nem direkt folyamatokhoz rendelhetők.

A Lane-modell tehát értelmes konstrukció, amely alkalmas a  $(p, p)$ , az  $(n, n)$  és a  $(p, \bar{n})$  szórás szisztematikus viselkedésének leírására, az ezen belüli ingadozása pedig értelmezhető. Külön vizsgálatot kívánt azonban annak a kételynek az eloszlása, amely nukleonátadó reakciókban fellépő töltéscserélő hatások Lane-modelles leírásával szemben fölmerült. A  $(d, p)$  szórásban az analóg neutroncsatorna nyílásánál megfigyelt küszöbhatás itt bemutatott következetes Lane-modell-analízise alátámasztja a leírásmód érvényét.

Ismereteink a nukleon és a mag töltéscserélő kölcsönhatásáról az utóbbi évek során jelentősen bővültek, és mint a 60-as évek végén, most is — egy magasabb szinten — telítődéshez vezettek. Úgy véljük, ráirányítva a figyelmet arra, hogy milyen feltételek mellett pontosan miről ad számot a Lane-modell, előmozdítottuk azokat a radikálisan új próbálkozásokat, amelyek közvetlenül a szabad nukleonok közti kölcsönhatáshoz nyúlnak a Lane-potenciál kiszámításában, és azokat is, amelyek a  $(p, \bar{n})$  folyamat Lane-modellel elvben le nem írható összetevőinek kutatására bontakoznak ki.



## UTÓSZÓ

E munkát 1973 és 1977 között az Oxfordi Egyetem Magfizikai Intézetében és Debrecenben, az MTA Atommagkutató Intézetében végeztem. A témát *P. E. Hodgson* annak tudatában javasolta, hogy ez az ATOMKI Elméleti Csoportjának sokéves érdeklődési irányába beleillett, s kidolgozását az tette lehetővé, hogy hazatérésem után e csoport programjába iktatta.

Oxfordi tanulmányutamon, melytől az indíttatást kaptam, vendéglátóm *P. E. Hodgson* volt, előkészítését és kiküldetésemet pedig *Berényi Dénesnek*, *Gyarmati Borbálának*, *Szalay Sándornak* és *Vertse Tamásnak* köszönhetem. Munkám során különösen sokat merítettem a *Gyarmati Borbálával*, *P. E. Hodgsonnal* és *R. S. Mackintoshal* folytatott beszélgetésekből. Számításaim végrehajtásában nagy része van annak, hogy *P. J. Ellistől*, *Fodor Ilonától* és *Vertse Tamástól* programokat kaptam, s az ATOMKI Számítástechnikai Csoportja készségesen segített.

Mindannyiuknak és fel nem sorolt segítőknek is hálásan mondok köszönetet. Külön köszönöm *Gyarmati Borbála* állandó ösztönző figyelmét és részletkérdések tisztázásáig menő számtalan értékes tanácsát.

## FÜGGELÉK

### A (6.16) egyenlet levezetése

Válasszunk egy olyan célmagot, mely neutrontöbblettel bír ( $N > Z$ ), és  $|T_0 T_0\rangle$  alapállapota egy  $|T_c T_c\rangle = \left|T_0 + \frac{1}{2}, T_0 + \frac{1}{2}\right\rangle$  kétszer mágikus törzshöz csatolt  $jm$  impulzusmomentumú neutronlyukból áll:

$$|T_0 T_0\rangle = \tilde{a}_{j, -m\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} |T_c T_c\rangle = (-)^{j-m} a_{jm\frac{1}{2}} |T_c T_c\rangle \equiv (-)^{j-m} a_{j\frac{1}{2}} |T_c T_c\rangle. \quad (\text{F.1})$$

(Ezentúl az impulzusmomentum  $m$  vetületének és az izospin  $\frac{1}{2}$  nagyságának kvantumszámát a rövidség kedvéért elhagyjuk.) A  $|T_0, T_0 - 1\rangle$  analóg állapot az 5. §. 1. pontjában idézett definíció szerint  $(2T_0)^{-\frac{1}{2}} T_- |T_0 T_0\rangle$ -al egyenlő, ahol a normálási tényező (1.12)-ből adódik. Felhasználva, hogy részecskeszám-reprezentációban

$$T_- = \sum_{\alpha} a_{\alpha, -\frac{1}{2}}^+ a_{\alpha\frac{1}{2}}, \quad (\text{F.2})$$

az analóg állapotra a

$$|T_0, T_0 - 1\rangle = (2T_0)^{-\frac{1}{2}} \sum_{\alpha} a_{\alpha, -\frac{1}{2}}^+ a_{\alpha\frac{1}{2}} |T_0 T_0\rangle = (-)^{j-m} (2T_0)^{-\frac{1}{2}} \sum_{\alpha} a_{\alpha, -\frac{1}{2}}^+ a_{\alpha\frac{1}{2}} a_{j\frac{1}{2}} |T_c T_c\rangle \quad (\text{F.3})$$

képletet kapjuk.

A potenciálmátrix az (1.8)-beli  $V_0(2)$  kölcsönhatásnak a  $\{|T_0 T_0, \pi(2)\rangle, |T_0, T_0 - 1; \nu(2)\rangle\}$  bázison képezett reprezentációja. Az (1.8) operátor részecskeszám-



reprezentánsára a 2-es részecskének a többivel való antiszimmetriáját elhanyagolva a

$$V^0 = \sum_{\alpha\beta\tau} \langle \alpha | v_0 + \tau t_{2z} v_1 | \beta \rangle a_{\alpha\tau}^+ a_{\beta\tau} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | v_1 | \beta \rangle (a_{\alpha\frac{1}{2}}^+ a_{\beta, -\frac{1}{2}} t_{2-} + a_{\alpha, -\frac{1}{2}}^+ a_{\beta\frac{1}{2}} t_{2+}) \quad (\text{F.4})$$

képletet kapjuk. A mátrixelemekben a keltő és eltüntető operátorok szorzatának a  $|T_c T_c\rangle$  vákuumon vett várható értékét direkt átrendezéssel vagy Wick tételének felhasználásával számíthatjuk ki. Az eredményül kapott mikroszkopikus tagokat a makroszkopikus tagokkal (1.10) módjára, továbbá (3.2) és (3.4)  $c$ -re alkalmazott kombinációjának (3.6)-tal való összevetése alapján

$$u_0 = \sum_{\alpha\tau} \langle \alpha | v_0 | \alpha \rangle, \quad u_1 = (2T_0 + 1)^{-1} \sum_{N \geq Z} \langle \alpha | v_1 | \alpha \rangle \quad (\text{F.5})$$

szerint azonosíthatjuk, ahol az  $N \geq Z$  jel a törzsbeli többletneutronoktól elfoglalt  $2T_0 + 1$  számú egyrészecske-állapotra való összegzést jelenti.

Az optikai protonpotenciált tehát a

$$\begin{aligned} V_{pp} &= \langle T_0 T_0, \pi(2) | V_0 | T_0 T_0, \pi(2) \rangle = \sum_{\alpha\beta\tau} \langle T_c T_c | a_{j\frac{1}{2}}^+ a_{\alpha\tau}^+ a_{\beta\tau} a_{j\frac{1}{2}} | T_c T_c \rangle \left\langle \alpha \left| v_0 - \frac{\tau}{2} v_1 \right| \beta \right\rangle = \\ &= \sum_{\alpha\beta\tau} (\delta_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha j} \delta_{\frac{1}{2}\tau} \delta_{\beta j}) \left\langle \alpha \left| v_0 - \frac{\tau}{2} v_1 \right| \beta \right\rangle = \sum_{\alpha\tau} \langle \alpha | v_0 | \alpha \rangle - \sum_{N \geq Z} \langle \alpha | v_1' | \alpha \rangle - \langle j | v_0 - v_1' | j \rangle_{\tau=\frac{1}{2}} = \\ &= u_0 - \frac{2T_0 + 1}{4} u_1 - \langle \varphi_n^{T_0 T_0} | v_0 - v_1' | \varphi_n^{T_0 T_0} \rangle, \end{aligned} \quad (\text{F.6})$$

a neutronpotenciált pedig hasonlóképpen a

$$\begin{aligned} V_{nn} &= \langle T_0, T_0 - 1; \nu(2) | V_0 | T_0, T_0 - 1; \nu(2) \rangle = \\ &= (2T_0)^{-1} \sum_{\alpha\beta\gamma\tau} \langle T_c T_c | a_{j\frac{1}{2}}^+ a_{\gamma\frac{1}{2}}^+ a_{\gamma, -\frac{1}{2}} a_{\alpha\tau}^+ a_{\beta\tau} a_{\epsilon, -\frac{1}{2}}^+ a_{\epsilon\frac{1}{2}} a_{j\frac{1}{2}} | T_c T_c \rangle \left\langle \alpha \left| v_0 + \frac{\tau}{2} v_1 \right| \beta \right\rangle = \\ &= \sum_{\alpha\tau} \langle \alpha | v_0 | \alpha \rangle + \sum_{N \geq Z} \langle \alpha | v_1' | \alpha \rangle - T_0^{-1} \sum_{N \geq Z} \langle \alpha | v_1' | \alpha \rangle - \\ &\quad - (2T_0)^{-1} \langle j | v_0 - v_1' | j \rangle_{\tau=\frac{1}{2}} - (2T_0 - 1)(2T_0)^{-1} \langle j | v_0 + v_1' | j \rangle_{\tau=\frac{1}{2}} = \\ &= u_0 + (2T_0 + 1)(T_0 - 1)(4T_0)^{-1} u_1 - (2T_0)^{-1} [\langle \varphi_p^{T_0, T_0-1} | v_0 - v_1' | \varphi_p^{T_0, T_0-1} \rangle + \\ &\quad + (2T_0 - 1) \langle \varphi_n^{T_0, T_0-1} | v_0 + v_1' | \varphi_n^{T_0, T_0-1} \rangle] \end{aligned} \quad (\text{F.7})$$

levezetéssel önthetjük félmikroszkopikus formába. A  $V_{np} = V_{pn}$  megkonstruálása ugyanígy történik:

$$\begin{aligned} &\langle T_0 T_0, \pi(2) | V_0 | T_0, T_0 - 1; \nu(2) \rangle = \\ &= (2\sqrt{2T_0})^{-1} \sum_{\alpha\beta\gamma} \langle T_c T_c | a_{j\frac{1}{2}}^+ a_{\alpha\frac{1}{2}}^+ a_{\beta, -\frac{1}{2}} a_{\gamma, -\frac{1}{2}} a_{\gamma\frac{1}{2}} a_{j\frac{1}{2}} | T_c T_c \rangle \langle \alpha | v_1 | \beta \rangle = \\ &= (2\sqrt{2T_0})^{-1} \left( \sum_{N \geq Z} \langle \alpha | v_1 | \alpha \rangle - \tau_{\frac{1}{2}} \langle j | v_1 | j \rangle_{\tau=\frac{1}{2}} \right) = \\ &= (2\sqrt{2T_0})^{-1} [(2T_0 + 1) u_1 - \langle \varphi_n^{T_0 T_0} | v_1 | \varphi_p^{T_0, T_0-1} \rangle]. \end{aligned} \quad (\text{F.8})$$

E képleteket (1.6)-ba behelyettesítve a (6.16) egyenleteket nyerjük.

IRODALOM

- Al-69: W. P. Alford, D. Cline, H. E. Gove, K. H. Purser és S. Skorka, Nucl. Phys. A130 119, 1969.  
 Al-75: W. P. Alford, R. A. Lindgren, D. Elmore és R. N. Boyd, Nucl. Phys. A243, 269, 1975.  
 Am-74: K. A. Amos és H. V. Geramb, Z. Physik 270, 149, 1974.  
 An-59: J. D. Anderson, C. C. Gardner, J. W. McClure, M. P. Nakada és C. Wong, Phys. Rev. 115, 1010, 1959.  
 An-61: J. D. Anderson és C. Wong, Phys. Rev. Lett. 7, 250, 1961.  
 An-69: J. D. Anderson, S. D. Bloom, C. Wong, W. F. Hornyak és V. A. Madsen, Phys. Rev. 177, 1416, 1969.  
 An-74: J. D. Anderson, Nuclear spectroscopy and reactions, szerk. J. Cerny, B kötet. Academic, New York, 1974. 613. o.  
 As-69: R. J. Ascutto és N. K. Glendenning, Phys. Rev. 181, 1396, 1969.  
 At-68: J. Atkinson és V. A. Madsen, Phys. Rev. Lett. 21, 295, 1968.  
 At-70: J. Atkinson és V. A. Madsen, Phys. Rev. C1, 1377, 1970.  
 Au-72: S. M. Austin, Proc. Symp. on the two-body force in nuclei, Gull Lake, 1971, szerk. S. M. Austin és G. M. Crawley, Plenum, New York, 1972. 285. o.  
 Ba-64: J. B. Ball, C. B. Fulmer és R. H. Bassel, Phys. Rev. 135, B706, 1964.  
 Ba-68a: C. J. Batty, B. E. Bonner, E. Friedman, C. Tschalär, L. E. Williams, A. S. Clough és J. B. Hunt, Nucl. Phys. A116, 643, 1968.  
 Ba-68b: C. J. Batty, B. E. Bonner, E. Friedman, C. Tschalär, L. E. Williams, A. S. Clough és J. B. Hunt, Nucl. Phys. A120, 297, 1968.  
 Ba-69: C. J. Batty, E. Friedman és G. W. Greenlees, Nucl. Phys. A127, 368, 1969.  
 Ba-73: H. W. Barz, V. E. Bunakov és A. M. El-Naiem, Nucl. Phys. A217, 141, 1973.  
 Be-56: J. R. Beyster, M. Walt és E. W. Salmi, Phys. Rev. 104, 1319, 1956.  
 Be-69: F. D. Becchetti, Jr. és G. W. Greenlees, Phys. Rev. 182, 1190, 1969.  
 Be-70: P. Beregi és I. Lovas, Phys. Lett. 33B, 150, 1970.  
 Bl-71: H. Bledsoe és T. Tamura, Nucl. Phys. A164, 191, 1971.  
 Bo-66: J. P. Bondorf, H. Lütken és S. Jägar, Proc. Conf. on isobaric spin in nucl. phys., Tallahassee, 1966, szerk. J. D. Fox és D. Robson. Academic, New York, 1966. 576. o.  
 Bo-69: A. Bohr és B. R. Mottelson: Nuclear structure I. Benjamin, New York, 1969. 275—277. o.  
 Bo-75: A. Bohr és B. R. Mottelson: Nuclear structure II. Benjamin, Reading (Mass.), 1975. 378. o.  
 Br-68a: D. M. Brink és G. R. Satchler: Angular momentum. Oxford University Press, Oxford, 1968. 78. o.  
 Br-68b: ibid. 52. o.  
 Bu-63: B. Buck, Phys. Rev. 130, 712, 1963.  
 Ca-73: J. D. Carlson, D. A. Lind és C. D. Zafiratos, Phys. Rev. Lett. 30, 99, 1973.  
 Ca-75: J. D. Carlson, C. D. Zafiratos és D. A. Lind, Nucl. Phys. A249, 29, 1975.  
 Ca-76: A. Calboreanu és S. Mancaş, Nucl. Phys. A266, 72, 1976.  
 Cl-67: R. L. Clarke és W. G. Cross, Nucl. Phys. A95, 320, 1967.  
 Cl-69: A. S. Clough, C. J. Batty, B. E. Bonner, C. Tschalär, L. E. Williams és E. Friedman, Nucl. Phys. A137, 222, 1969.  
 Cl-70a: A. S. Clough, C. J. Batty, B. E. Bonner és L. E. Williams, Nucl. Phys. A143, 385, 1970.  
 Cl-70b: R. G. Clarkson, W. R. Coker és C. F. Moore, Phys. Rev. C2, 1097, 1970.  
 Co-63: B. L. Cohen és O. V. Chubinsky, Phys. Rev. 131, 2184, 1963.  
 Co-69: R. Coker és T. Tamura, Phys. Rev. 182, 1277, 1969.  
 Co-70: B. J. Cole, R. Huby és J. R. Mines, Phys. Lett. 33B, 320, 1970.  
 Co-71: W. R. Coker, C. L. Hollas, P. J. Riley és S. Sen, Phys. Rev. C4, 836, 1971.  
 Co-72: W. R. Coker és G. W. Hoffmann, Phys. Lett. 40B, 81, 1972.  
 Co-73a: W. R. Coker, T. Udagawa és H. H. Wolter, Phys. Rev. C7, 1154, 1973.  
 Co-73b: S. Cotanch és D. Robson, Phys. Rev. C7, 1714, 1973.  
 Co-73c: S. Cotanch és D. Robson, Nucl. Phys. A209, 301, 1973.  
 Co-76: S. R. Cotanch és C. M. Vincent, Phys. Rev. C14, 1739, 1976.  
 Cr-72: G. M. Crawley, P. S. Miller, A. Galonsky, T. Amos és R. Doering, Phys. Rev. C6, 1890, 1972.  
 Cu-68: N. Cue és P. Richard, Phys. Rev. 173, 1108, 1968.  
 Da-74: J. Dąbrowski és P. Haensel, Can. J. Phys. 52, 1768, 1974.  
 de-63: A. de-Shalit és I. Talmi: Nuclear shell theory. Academic, New York, 1963. 483—484. o.  
 Do-72: C. B. Dover és Nguyen Van Giai, Nucl. Phys. A190, 373, 1972.



- Do-75: R. R. Doering, D. M. Patterson és A. Galonsky, Phys. Rev. C12, 378, 1975.
- Du-71: W. H. Dunlop, Ph. D. értekezés, University of California, Los Angeles, 1971.
- En-77: P. M. Endt, Atomic Data and Nuclear Data Tables 19, 23, 1977.
- Fa-72: W. E. Fadner, J. J. Kraushaar és S. I. Hayakawa, Phys. Rev. C5, 859, 1972.
- Fi-74: H. W. Fielding, L. D. Rickertsen, P. D. Kunz, D. A. Lind és C. D. Zafiratos, Phys. Rev. Lett. 33, 226, 1974.
- Fo-70a: L. Fonda és G. C. Ghirardi: Symmetry principles in quantum mechanics. Dekker, New York, 1970. 255—260. o.
- Fo-70b: I. Fodor, Phys. Lett. 31B, 336, 1970.
- Fo-74: I. Fodor, Proc. of a Panel on charged-particle-induced radiative capture, Bécs, 1972, szerk. J. W. Weil. IAEA, Bécs, 1974. 129. o.
- Fr-62: J. B. French és M. H. Macfarlane, Phys. Lett. 2, 255, 1962.
- Fr-67: W. E. Frahn, Fundamentals in nuclear theory, szerk. A. de-Shalit és C. Villi. IAEA, Bécs, 1967. 3. o.
- Fu-62: C. B. Fulmer, Phys. Rev. 125, 631, 1962.
- Ga-73: A. Galonsky, J. G. Branson, R. R. Doering és D. M. Patterson, Michigan State University Cyclotron Laboratory report MSUCL-101, 1973.
- Ge-71: H. V. Geramb és K. A. Amos, Nucl. Phys. A163, 337, 1971.
- Gl-66: N. K. Glendenning és M. Vénéroni, Phys. Rev. 144, 839, 1966.
- Gl-69: N. K. Glendenning, Nuclear structure and nuclear reactions, Proc. Int. School „Enrico Fermi” XL, Varenna, 1967, szerk. M. Jean és R. A. Ricci. Academic, New York, 1969. 332. o.
- Go-72: L. J. B. Goldfarb és K. Takeuchi, Nucl. Phys. A181, 609, 1972.
- Go-74a: L. J. B. Goldfarb és K. Takeuchi, Nucl. Phys. A218, 396, 1974.
- Go-74b: L. J. B. Goldfarb és K. Takeuchi, Nucl. Phys. A218, 405, 1974.
- Gr-68: G. W. Greenlees, G. J. Pyle és Y. C. Tang, Phys. Rev. 171, 1115, 1968.
- Gr-73a: S. M. Grimes, J. D. Anderson, J. C. Davis, W. H. Dunlop és C. Wong, Phys. Rev. Lett. 30, 992, 1973.
- Gr-73b: G. Graw, W. Stach, G. Gaul és C. Hagegan, Phys. Rev. Lett. 30, 989, 1973.
- Gr-75: S. M. Grimes, C. H. Poppe, J. D. Anderson, J. C. Davis, W. H. Dunlop és C. Wong, Phys. Rev. C11, 158, 1975.
- Gy-71a: B. Gyarmati és T. Vertse, Nucl. Phys. A160, 523, 1971.
- Gy-71b: B. Gyarmati, R. G. Lovas és J. Zimányi, Phys. Lett. 35B, 549, 1971.
- Gy-76: B. Gyarmati, T. Vertse, G. Ya. Tertichny és E. L. Yadrovsky, ATOMKI Közl. 18, 31, 1976.
- Ha-67: E. W. Hamburger, Phys. Rev. Lett. 19, 36, 1967.
- Ha-73: S. I. Hayakawa, Phys. Rev. C8, 1843, 1973.
- Ha-75: P. Haensel, Nucl. Phys. A245, 29, 1975.
- Hi-67: A. D. Hill, University of Oxford, 1967, publikálatlan.
- Hi-70: R. A. Hinrichs, R. Sherr, G. M. Crawley és I. Proctor, Phys. Rev. Lett. 25, 829, 1970.
- Ho-63: P. E. Hodgson, Phys. Lett. 6, 75, 1963.
- Ho-69: M. B. Hooper, Proc. Conf. on nuclear isospin, Asilomar, 1969, szerk. J. D. Anderson, S. D. Bloom, J. Cerny és W. W. True. Academic, New York, 1969. 275. o.
- Ho-70: P. E. Hodgson, Nucl. Phys. A150, 1, 1970.
- Ho-72a: G. W. Hoffmann, W. H. Dunlop, G. J. Igo, J. G. Kulleck, C. A. Whitten, Jr. és W. R. Coker, Phys. Lett. 40B, 453, 1972.
- Ho-72b: G. W. Hoffmann, W. R. Coker, S. A. A. Zaidi és D. O. Elliott, Jr., Phys. Lett. 41B, 47, 1972.
- Ho-73a: G. W. Hoffmann és W. R. Coker, Phys. Lett. 47B, 285, 1973.
- Ho-73b: G. W. Hoffmann, Phys. Rev. C8, 761, 1973.
- Ho-74: G. W. Hoffmann és W. R. Coker, Z. Phys. 269, 307, 1974.
- Ho-75: P. E. Hodgson, Rep. Phys. 38, 847, 1975.
- Hu-73: R. Huby, Cooperative phenomena, szerk. H. Haken és M. Wagner. Springer, Berlin, 1973. 325. o.
- Is-75: T. Ishimatsu, H. Saito, M. Yambe és T. Awaya, Nucl. Phys. A246, 21, 1975.
- Ja-69: A. D. Jackson, T. T. S. Kuo és J. D. Vergados, Phys. Lett. 30B, 455, 1969.
- Jä-69: J. Jänecke, Isospin in nuclear physics, szerk. D. H. Wilkinson. North-Holland, Amsterdam, 1969. 297. o.
- Je-76: J. P. Jeukenne, A. Lejeune és C. Mahaux, Phys. Reports 25C, 85, 1976.
- Je-77a: J. P. Jeukenne, A. Lejeune és C. Mahaux, Phys. Rev. C15, 10, 1977.
- Je-77b: J. P. Jeukenne, A. Lejeune és C. Mahaux, Phys. Rev. C16, 80, 1977.
- Jo-73: R. K. Jolly, T. M. Amos, A. Galonsky, R. Hinrichs és R. St. Onge, Phys. Rev. C7, 1903, 1973.



- Ju-77: K. Juhász és R. G. Lovas, *ATOMKI Közl.* 19, 223, 1977.  
 Ko-72: R. L. Kozub és D. H. Youngblood, *Phys. Rev. Lett.* 28, 1529, 1972.  
 Ko-77: J. E. Koops és P. W. M. Glaudemans, *Z. Physik A280*, 181, 1977.  
 Kr-71: W. Kretschmer és G. Graw, *Phys. Rev. Lett.* 27, 1294, 1971.  
 Ku-69: P. D. Kunz, University of Colorado, 1969, publikálatlan.  
 Ku-73: P. D. Kunz, University of Colorado, 1973, publikálatlan.  
 Ku-74: P. D. Kunz, L. D. Rickertsen és G. W. Hoffmann, *Phys. Rev. C9*, 1659, 1974.  
 Ku-76: P. D. Kunz és L. A. Charlton, *Phys. Lett.* 61B, 1, 1976.  
 La-62a: A. M. Lane, *Nucl. Phys.* 35, 676, 1962.  
 La-62b: A. M. Lane és J. M. Soper, *Nucl. Phys.* 37, 506, 1962.  
 La-70: A. M. Lane, *Phys. Lett.* 33B, 274, 1970.  
 La-77: A. M. Lane, magánközlés.  
 Lo-73: Lovas R., *Magyar Fiz. Folyóirat* 21, 519, 1973.  
 Lo-74: R. G. Lovas, *Acta Phys. Hung.* 36, 165, 1974.  
 Lo-77: W. G. Love, *Phys. Rev. C15*, 1261, 1977.  
 Ma-66: V. A. Madsen, *Nucl. Phys.* 80, 177, 1966.  
 Ma-71: B. Mayer, J. Gosset, J. L. Escudie és H. Kamitsubo, *Nucl. Phys. A177*, 205, 1971.  
 Ma-72a: V. A. Madsen, M. J. Stomp, V. R. Brown, J. D. Anderson, L. Hansen, C. Wong és J. J. Wesolowski, *Phys. Rev. Lett.* 28, 629, 1972.  
 Ma-72b: W. Makofske, G. W. Greenlees, H. S. Liers és G. J. Pyle, *Phys. Rev. C5*, 780, 1972.  
 Ma-73: R. S. Mackintosh, *Phys. Lett.* 44B, 437, 1973.  
 Ma-76: V. A. Madsen, V. R. Brown, S. M. Grimes, C. H. Poppe, J. D. Anderson, J. C. Davis és C. Wong, *Phys. Rev. C13*, 548, 1976.  
 Ma-77a: R. S. Mackintosh és L. A. Cordero-L., *Phys. Lett.* 68B, 213, 1977.  
 Ma-77b: R. S. Mackintosh, magánközlés.  
 Me-61a: A. Messiah: *Quantum mechanics*. North-Holland, Amsterdam, 1961. 1054. o.  
 Me-61b: *ibid.* 1075—1076. o.  
 Me-61c: *ibid.* 422. o.  
 Me-75: F. Meurders és G. de Korte, *Nucl. Phys. A249*, 205, 1975.  
 Me-76: F. Meurders, P. W. M. Glaudemans, J. F. A. Van Hienen és G. A. Timmer, *Z. Physik A276*, 113, 1976.  
 Mi-71: P. S. Miller és G. T. Garvey, *Nucl. Phys. A163*, 65, 1971.  
 Mo-66: C. F. Moore, C. E. Watson, S. A. A. Zaidi, J. J. Kent, és J. G. Kulleck, *Phys. Rev. Lett.* 17, 926, 1966.  
 Mo-72: J. M. Moss, C. Brassard, R. Vyse és J. Gosset, *Phys. Rev. C6*, 1698, 1972.  
 Né-73: J. Németh és G. Fáti, *Proc. Symp. on correlations in nuclei*, Balatonfüred, 1973, szerk. J. Németh. ELFT, Budapest, 1974. 41. o.  
 Né-74: J. Németh és G. Fáti, *Phys. Lett.* 48B, 191, 1974.  
 No-70: J. V. Noble, *Phys. Rev. Lett.* 25, 1458, 1970.  
 Pa-76: D. M. Patterson, R. R. Doering és A. Galonsky, *Nucl. Phys. A263*, 261, 1976.  
 Pe-63: F. G. Perey, *Phys. Rev.* 131, 745, 1963.  
 Ra-59: L. A. Rayburn, *Phys. Rev.* 116, 1571, 1959.  
 Ri-73: L. D. Rickertsen és P. D. Kunz, *Phys. Lett.* 47B, 11, 1973.  
 Ro-65: D. Robson, *Phys. Rev.* 137, B535, 1965.  
 Sa-64a: G. R. Satchler, R. M. Drisko és R. H. Bassel, *Phys. Rev.* 136, B637, 1964.  
 Sa-64b: G. R. Satchler, *Nucl. Phys.* 55, 1, 1964.  
 Sa-66: G. R. Satchler, *Nucl. Phys.* 77, 481, 1966.  
 Sa-67a: G. R. Satchler, *Nucl. Phys. A91*, 75, 1967.  
 Sa-67b: G. R. Satchler, *Nucl. Phys. A95*, 1, 1967.  
 Sa-69: G. R. Satchler, *Isospin in nuclear physics*, szerk. D. H. Wilkinson. North-Holland, Amsterdam, 1969. 389. o.  
 Sa-73a: G. R. Satchler, *Proc. Conf. on nuclear physics*, München, 1973, szerk. J. de Boer és H. J. Mang. North-Holland, Amsterdam, 1973. 569. o.  
 Sa-73b: G. R. Satchler, *Phys. Lett.* 44B, 13, 1973.  
 Sc-69a: J. P. Schiffer, *Isospin in nuclear physics*, szerk. D. H. Wilkinson. North-Holland, Amsterdam, 1969, 665. o.  
 Sc-69b: H. L. Scott, C. P. Swann és F. Rauch, *Nucl. Phys. A134*, 667, 1969.  
 Sc-70: R. Schaeffer, *Nucl. Phys. A158*, 321, 1970.  
 Sc-74a: S. D. Schery, D. A. Lind és C. D. Zafiratos, *Phys. Rev. C9*, 416, 1974.



- Sc-74b: S. D. Schery, D. A. Lind, H. W. Fielding és C. D. Zafiratos, Nucl. Phys. A234, 109, 1974.  
 Sc-76: S. D. Schery, D. A. Lind és H. Wieman, Phys. Rev. C14, 1800, 1976.  
 Si-66: R. H. Siemssen, G. C. Morrison, B. Zeidman és H. Fuchs, Phys. Rev. Lett. 16, 1050, 1966.  
 Ta-67: T. Tamura és C. E. Watson, Phys. Lett. 25B, 186, 1967.  
 Ta-74: T. Tamura, Phys. Reports 14C, 59, 1974.  
 Th-68: N. Thurlow, Nucl. Phys. A109, 471, 1968.  
 Ts-74: H. Tsubota, N. Kawamura, S. Oikawa és K. Shoda, J. Phys. Soc. Japan 37, 17, 1974.  
 Tu-74: A. I. Tutubalin, A. P. Kljuczarev, V. Ja. Golovnya és A. Sz. Kacsan, JAF 19, 959, 1974.  
 Un-66: T. Une, S. Yamaji és H. Yoshida, Prog. Theor. Phys. 35, 1010, 1966.  
 Ve-66: J. Vervier, Nucl. Phys. 75, 17, 1966.  
 Ve-70: Vertse T., ATOMKI Közl. 12, 213, 1970.  
 Ve-72: T. Vertse, Oxford University, Nuclear Physics Theoretical Group Report 45. 1972.  
 Ve-73: Vertse T., ATOMKI Közl. 15, 139, 1973.  
 Vo-69: G. Vourvopoulos, R. Shoup, J. D. Fox és J. B. Ball, Proc. Conf. on nuclear isospin, Asilomar, 1969, szerk. J. D. Anderson, S. D. Bloom, J. Cerny és W. W. True. Academic, New York, 1969. 205. o.  
 Wi-65: D. Wilmore, UK Atomic Energy Research Establishment, Harwell, 1965, publikálatlan.  
 Wo-72a: C. Wong, J. D. Anderson, J. W. McClure, B. A. Pohl és J. J. Wesolowski, Phys. Rev. C5, 158, 1972.  
 Wo-72b: T. J. Woods, C. A. Whitten, Jr. és G. J. Igo, Nucl. Phys. A198, 542, 1972.  
 Wo-72c: T. J. Woods, Proc. Symp. on the two-body force in nuclei, Gull Lake, 1971, szerk. S. M. Austin és G. M. Crawley. Plenum, New York, 1972. 307. o.  
 Wo-73: C. Wong, J. D. Anderson, J. C. Davis és S. M. Grimes, Phys. Rev. C7, 1895, 1973.  
 Wo-74: T. J. Woods, Phys. Lett. 50B, 302, 1974.  
 Wo-75a: C. Wong, V. R. Brown, J. D. Anderson, J. C. Davis, S. M. Grimes, C. H. Poppe és V. A. Madsen, Phys. Rev. C11, 137, 1975.  
 Wo-75b: C. Wong, J. D. Anderson, V. R. Brown, J. C. Davis, S. M. Grimes, V. A. Madsen, és C. H. Poppe, Phys. Rev. C12, 2115, 1975.  
 Za-66: S. A. A. Zaidi és P. von Brentano, Phys. Lett. 23, 466, 1966.  
 Za-73: S. A. A. Zaidi, G. W. Hoffmann és W. R. Coker, Z. Physik 260, 329, 1973.  
 Zi-68a: J. Zimányi és B. Gyarmati, Phys. Rev. 174, 1112, 1968.  
 Zi-68b: J. Zimányi és B. Gyarmati, Phys. Lett. 27B, 120, 1968.

#### A DOLGOZAT EREDMÉNYEIT TARTALMAZÓ CIKKEK

1. R. G. Lovas: On the self-consistency of the Lane model, Nucl. Phys. A262, 356, 1976.
2. R. G. Lovas: Fluctuations in the Lane potential and  $(p, n)$  transitions to anti-analogue states, Phys. Lett. 71B, 16, 1977.
3. R. G. Lovas: Lane-model description of  $(p, n)$  reactions to anti-analogue states, Proc. Symp. on nuclear reactions, Balatonfüred, 1977, szerk. L. P. Csernai. KFKI, Budapest, 1978. 148. o.
4. R. G. Lovas: Core plus single-particle model for quasi-elastic  $(p, n)$  scattering, Proc. Symp. on nuclear reactions, Balatonfüred, 1977, szerk. L. P. Csernai. KFKI, Budapest, 1978. 226. o.
5. R. G. Lovas: Charge-exchange transitions on neighbouring nuclei in a semi-microscopic model, Nucl. Phys. A304, 282, 1978.
6. R. G. Lovas: Improved coupled-channel treatment of the  $(d, n)$  threshold effect, Nucl. Phys. A285, 198, 1977.



# A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

## SUGÁRZÁS KIBOCSÁTÁSÁNAK ÉS ELNYELÉSÉNEK KVANTUMELMÉLETE\*

P. A. M. DIRAC

### 1. §. Bevezetés és áttekintés

Az új kvantumelmélet, amely azon a feltevésen alapszik, hogy a dinamikai változók nem tesznek eleget a szorzás felcserélési törvényének, jelenleg már eléggé fejlett ahhoz, hogy meglehetősen teljes dinamikai elméletül szolgáljon. Tárgyalni tudjuk matematikailag egy sok részecskéből álló dinamikai rendszer problémáját pillanatszerűen ható erők jelenlétében, feltéve, hogy a rendszer leírható egy Hamilton-függvénnyel, és a matematikai eredmények fizikailag egy jól definiált általános módszer alapján értelmezhetők. Másrészről mind ez ideig a kvantum-elektrodinamikában igen kevés haladás történt. Olyan kérdések korrekt tárgyalása, mint az erők fénysebességgel való terjedése a pillanatnyi távolbahatás helyett, vagy elektromágneses tér keltése mozgó elektron által és ennek a térnek az elektronokra való visszahatása, még el sem kezdődött. Ráadásul komoly nehézség forog fenn a speciális relativitás elve minden követelményét kielégítő elmélet felállításában, mivel a Hamilton-féle függvény többé nem használható. Ez a relativisztikus probléma persze kapcsolatban áll az előzőekkel és egyetlen kérdés sem válaszolható meg anélkül, hogy ugyanakkor ne válaszoljunk a többiekre is. Mégis — úgy látszik — lehetséges kielégítően felépíteni a sugárzás kibocsátásának és a sugárzó rendszerre gyakorolt sugárzási visszahatásnak az elméletét nem szigorúan relativisztikus kinematika és dinamika alapján. Ez a fő tárgya a jelen írásnak. Az elmélet csak annyiban nem relativisztikus, hogy az időt végig  $c$  számnak (azaz klasszikus mennyiségnek, fordító megjegyzése) tekinti, ahelyett, hogy a térkoordinátákkal szimmetrikusan tárgyalná. A tömeg relativisztikus sebességfüggését minden nehézség nélkül tekintetbe lehet venni.

Az elmélet alap gondolata nagyon egyszerű. Tekintsünk egy atomot kölcsönhatásban olyan sugárzási térrel, amelyet a meghatározottság kedvéért körülhatárolt helyre bezárva gondolunk el úgy, hogy a rendszer a szabadsági fokoknak csak diszkrét sorozatával rendelkezik. A sugárzást felbontjuk Fourier-komponenseire, mindegyik komponens energiáját és fázisát a sugárzási teret leíró dinamikai változónak tekintjük. Így, ha  $E_r$  az  $r$  indexű komponens energiája és  $\theta_r$  a hozzá tartozó fázis (lényegében az idő, mivel a hullám standard fázisban van), feltételezhetjük, hogy mindegyik  $E_r$  és  $\theta_r$  kanonikusan konjugált változópárt alkot. A tér (mező) és az atom közötti mindennemű kölcsönhatás hiányában a tér és az atom együttes rendszere a

$$H = \sum_r E_r + H_0 \quad (1)$$

\* Megjelent Proc. Roy. Soc. Lond., A, 114, 243, 1927.



Hamilton-függvénnyel írható le, amely az összen energiával egyenlő, ( $H_0$  a magányos atom Hamilton-féle függvénye), mivel az  $E_r$  és  $\theta_r$  változók nyilván eleget tesznek kanonikus mozgásegyenletüknek:

$$\dot{E}_r = -\frac{\partial H}{\partial \theta_r} = 0, \quad \dot{\theta}_r = \frac{\partial H}{\partial E_r} = 1.$$

Ha kölcsönhatás áll fenn a tér és az atom között, akkor ez a klasszikus elméletben úgy vehető számításba, hogy az (1) Hamilton-függvényhez hozzáadunk egy kölcsönhatási tagot, amely az atom változóinak és a sugárzási teret leíró  $E_r$  és  $\theta_r$  változók függvénye. Ez a kölcsönhatási tag adja meg a sugárzás hatását az atomra és az atom visszahatását a sugárzási térre.

Avégből, hogy a kvantumelméletre hasonló módszert használhassunk, fel kell tennünk, hogy az  $E_r$  és  $\theta_r$  változók olyan  $q$  számok (kvantumelméleti mennyiségek, fordító megjegyzése), amelyek a probléma más dinamikai változóihoz hasonlóan eleget tesznek a  $\theta_r E_r - E_r \theta_r = i\hbar$ , s a többi szabványos kvantumfeltételeknek, ahol  $\hbar$  a szokásos Planck-féle állandónak  $(2\pi)^{-1}$ -szerese. Ez a feltétel közvetlenül megadja a sugárzás kvantumtulajdonságait.\* Ugyanis, ha  $\nu_r$  az  $r$ -edik összetevő frekvenciája,  $2\pi\nu_r\theta_r$  egy szögváltozó, úgy, hogy kanonikus konjugáltja  $E_r/2\pi\nu_r$  csak diszkrét,  $\hbar$  többszöröseiben különböző értéksorozatot vehet fel, azaz  $E$  csupán a  $(2\pi\hbar)\nu_r$  egészszámú többszöröseivel változhatik. Ha most egy (a klasszikus elméletből átvett) kölcsönhatási tagot adunk az (1) Hamilton-függvényhez, a feladat megoldható kvantummechanika szabályainak megfelelően és remélhetjük, hogy a sugárzás és az atom egymásra való hatása számára helyes eredményt kapunk. Meg fogjuk mutatni, hogy tényleg megkapjuk a sugárzás emissziójának és abszorpciójának helyes törvényeit és az Einstein-féle  $A$  és  $B$  kifejezések helyes értékeit. A szerző korábbi elméletében,\*\* ahol a sugárzáskomponensek energiái és fázisai  $c$  számok voltak, csupán a  $B$ -k voltak meghatározhatók és az atom reakciója a sugárzásra nem volt számbavehető.

Meg fogjuk mutatni, hogy az atom és az elektromágneses hullámok közötti kölcsönhatást leíró Hamilton-operátor egyenlővé tehető egy olyan Hamilton-operátorral, ami az atom és a fénysebességgel mozgó, Einstein—Bose-féle statisztikát kielégítő részecskék sokasága közötti kölcsönhatás problémájához tartozik, ha a részecskék kölcsönhatási energiáját alkalmasan választjuk. A meghatározott energiájú és irányú részecskék száma, amely Hamilton-függvényben dinamikai változóként használható, egyenlő a hullámokra vonatkozó Hamilton-függvényben szereplő egyes hullámok energiakvantumainak számával. Így teljes összhang van a kölcsönhatásnak a hullámok szerinti és a fénykvantumok szerinti leírása között. Mi fénykvantum nézőpontból építjük fel az elméletet és megmutatjuk, hogy a Hamilton-függvény természetes módon olyan alakba megy át, amely a hullámképbeli függvényhez hasonlít.

\* Hasonló feltevést használtak Born és Jordan („Z. f. Physik”, 34, 886, 1925.) avégett, hogy a sugárzásokibocsátás klasszikus formuláját átvigyék a kvantumelméletbe, továbbá Born, Heisenberg és Jordan („Z. f. Physik”, 35, 606, 1925.), hogy a feketetest sugárzási terében fellépő energiafluktuációkat kiszámítsák.

\*\* „Roy. Soc. Proc.” A, 112, 661, 5. §, 1926. A továbbiakban *loc. cit.*, I.



Az elmélet matematikai kifejlesztését a kvantum-mátrixoknak a szerzőtől származó általános transzformációs elmélete tette lehetővé.\* Amiatt, hogy az időt  $c$ -számnak tekintjük, használhatjuk valamely dinamikai változó fogalmát egy adott időpillanatban. Ez az érték egy  $q$ -szám, amely alkalmas általánosított „mátrix”-szal való reprezentálásra különböző mátrixsémáknak megfelelően, melyek közül némelyek folytonos sorral és oszloppal rendelkeznek és mátrixelemeik bizonyos ( $\delta$  függvényekkel megadott típusú\*\*) végtelent foglalhatnak magukba. Mindig található olyan mátrixséma, amelyben a dinamikai rendszer mozgásintegráljainak tetszőleges kommutáló sorozatát diagonális mátrixok ábrázolják, vagy amelyben adott felcserélhető változók mátrixa egy kiválasztott időpillanatban diagonális.\*\*\* Egy diagonális,  $q$  számot ábrázoló mátrix diagonális elemeinek értékei ezen  $q$  számok (karakterisztikus) sajátértékei. Egy Descartes-féle koordináta vagy impulzus általában minden értéket felvesz  $-\infty$ -tól  $+\infty$ -ig, míg egy hatásváltozó a sajátértékek diszkrét sorozatát veszi csak fel. (Szabállyá tesszük, hogy vesszőtlen betűk a dinamikai változókat vagy  $q$  számokat jelöljék és ugyanazon betűk vesszővel vagy több vesszővel a sajátértékeit. A transzformációs függvények vagy a sajátfüggvények a sajátértékek és nem maguknak a  $q$  számoknak a függvényei, így ezeket mindig vesszős változók kifejezéseként kellene felírni.)

Ha  $f(\xi, \eta)$  a  $\xi_k, \eta_k$  kanonikus változók valamely függvénye, akkor az  $f$ -et reprezentáló mátrix bármely  $t$  időben minden nehézség nélkül felírható olyan mátrixsémában, amelyben  $\xi_k$ -k a  $t$  időpontban diagonális mátrixok; ugyanis maguk a  $\xi_k$ -t és  $\eta_k$ -t reprezentáló mátrixok a  $t$  pillanatban ismertek, nevezetesen:

$$\left. \begin{aligned} \xi_k(\xi' \xi'') &= \xi' \delta(\xi' \xi'') \\ \eta_k(\xi' \xi'') &= -i\hbar \delta(\xi'_1 - \xi''_1) \dots \delta(\xi'_{k-1} - \xi''_{k-1}) \delta'(\xi'_k - \xi''_k) \delta(\xi'_{k+1} - \xi''_{k+1}) \dots \end{aligned} \right\}. \quad (2)$$

Így, ha a  $H$  Hamilton-függvény (operátor), mint  $\xi_k$  és  $\eta_k$  függvénye adott, akkor azonnal felírhatjuk a  $H(\xi', \xi'')$  mátrixot. Ekkor a  $(\xi'/\alpha')$  transzformációs függvény, amely olyan  $(\alpha)$  mátrixsémába transzformál, amelyben a Hamilton-operátor egy diagonális mátrix, kielégíti a

$$\int H(\xi' \xi'') d\xi''(\xi''/\alpha') = W(\alpha') \cdot (\xi'/\alpha') \quad (3)$$

integrálegyenletet, amelynek sajátértékei a  $W(\alpha')$  energiaszintek. Ez az egyenlet éppen a  $(\xi'/\alpha')$  sajátfüggvényekre vonatkozó Schrödinger-féle hullámeqyenlet. Ez a  $\xi_k$ -t és  $\eta_k$ -t reprezentáló mátrixokra felírt (2) speciális egyenletek következtében közönséges differenciálegyenletté válik, ha  $H$  az  $\xi_k$  és  $\eta_k$ -k egyszerű algebrai függvénye. A (3) egyenlet az általánosabb

$$\int H(\xi' \xi'') d\xi''(\xi''/\alpha') = i\hbar \partial(\xi'/\alpha')/\partial t \quad (3')$$

\* „Roy. Soc. Proc.” A, 113, 621, 1927. Ezt jelöljük később így: *loc. cit.* II. Lényegében egyenértékű elméletet kapott függetlenül Jordan („Z. f. Physik,” 40, 809, 1927.). Lásd még *F. London*, Z. f. Physik, 40, 193, 1926.

\*\* *Loc. cit.* II, 2. §.

\*\*\* Lehet olyan mátrixsémánk is, amelyben az adott felcserélhető változókat minden időpontban diagonális mátrixok reprezentálják, ha feláldozzuk azt a feltételt, hogy a mátrixoknak ki kell elégíteniük a mozgásegyenleteket. A transzformációs függvény ilyen sémából egy olyanba, melyben mozgásegyenletek kielégülnek, explicite tartalmazza az időt. Lásd *loc. cit.* II. 628. oldal.



alakban írható. Ez alkalmazható olyan rendszerekre, melyekre nézve a Hamilton-operátor explicite tartalmazza az időt.

Előfordulhat olyan dinamikai rendszer is, amelyet jellemző  $H$  Hamilton-függvény (operátor) nem fejezhető ki a kanonikus változók egy sorozatának algebrai függvényeként, de ennek ellenére reprezentálható egy  $H(\xi', \xi'')$  mátrixszal. Ilyen probléma is megoldható a jelen módszerrel, mivel még mindig használhatjuk a (3) egyenletet az energiaszintek és a sajátfüggvények meghatározására. Azt fogjuk találni, hogy a fénykvantum és az atomi rendszer kölcsönhatását leíró Hamilton-operátor vagy függvény ilyen általánosabb típusú úgy, hogy a kölcsönhatást matematikailag tárgyalhatjuk anélkül, hogy a szokásos értelemben beszélhetnénk kölcsönhatási potenciális energiáról.

Vegyük észre a különbséget a fényhullám és a fénykvantummal kapcsolatos de Broglie vagy Schrödinger-féle hullám között. Először is a fényhullám mindig valós, míg a meghatározott irányban mozgó fénykvantummal kapcsolatos de Broglie-féle hullám egy képzetes kitevőjű hatványt tartalmaz. Sokkal fontosabb különbség az, hogy intenzitásukat különböző módon kell értelmezni. A monokromatikus fényhullámhoz tartozó fénykvantumok térfogategységenkénti száma egyenlő a térfogategységenkénti energia osztva egyetlen fénykvantum  $(2\pi\hbar)\nu$  energiájával. Másrészt az  $a$  amplitúdó és a képzetes exponenciális tényező szorzatával leírt monokromatikus de Broglie-hullámot úgy kell értelmezni, hogy  $a^2$  megadja térfogategységenként a fénykvantumok számát minden frekvenciára (azaz frekvenciától függetlenül). Ez speciális esete a mátrix-analízis\* értelmezéséhez tartozó általános szabálynak, amely szerint, ha  $(\xi'/\alpha')$  vagy  $\psi_{\alpha'}(\xi'_k)$  egy atomi rendszer (vagy egyszerű részecske)  $\alpha'$  állapotának  $\xi'_k$  változókkal kifejezett sajátfüggvénye, akkor  $|\psi_{\alpha'}(\xi'_k)|^2$  annak valószínűsége, hogy  $\xi'_k$  értéke  $\xi'_k$  — vagy ha a  $\xi'_k$ -k a sajátértékek folytonos sorozatával rendelkeznek, akkor  $|\psi_{\alpha'}(\xi'_k)|^2 d\xi'_1 d\xi'_2 \dots$  a valószínűsége annak, hogy mindegyik  $\xi'_k$ ,  $\xi'_k$  és  $\xi'_k + d\xi'_k$  közé esik —, feltéve, hogy a rendszer minden fázisa egyenlően valószínű. Az első módon interpretált intenzitású hullám csak akkor jelenik meg az elméletben, ha a hullámhoz tartozó részecskék Einstein—Bose-statisztikát követnek. Az elektronokhoz nem tartozik ilyen hullám.

## 2. §. Független rendszerek sokaságának perturbációja

Most vizsgáljuk meg azokat az átmeneteket, amelyek egy atomi rendszerben történnek tetszőleges perturbáció hatására. Módszerünk ugyanaz, mint amelyet a szerző korábban megadott;\* ez egyszerű módon vezet olyan egyenletekre, amelyek meghatározzák annak valószínűségét, hogy a rendszer tetszőleges időpontban a perturbálatlan rendszer tetszőleges stacionárius állapotában legyen.\*\* Innen persze közvetlenül megkapjuk a rendszerek sokasága esetén a rendszerek valószínű számát az adott időpontban az adott állapotban, ha a rendszerek egymástól függetlenek és mind azonos módon perturbálódnak. A mostani fejezet tárgya annak megmutatása,

\* Loc. cit., II. 6., 7. §-ok.

\* Loc. cit. I.

\*\* Ezt az elméletet legutóbb Born kiterjesztette („Z. f. Physik”, 40, 167, 1926.) úgy, hogy számításba vette a perturbáció révén létrejövő adiabatikus változásokat a stacionárius állapotokban. Ez a kiterjesztés a jelen írásban nem szerepel.



hogy ezen valószínű számok változási sebességére vonatkozó egyenletek egyszerű módon hamiltoni alakra hozhatók, ami lehetővé teszi az elmélet továbbfejlesztését.

Legyen  $H_0$  a perturbálatlan rendszer Hamilton-függvénye és  $V$  a perturbáló energia, amely a dinamikai változók tetszőleges függvénye lehet és esetleg tartalmazhatja az időt explicite; így a perturbált rendszer Hamilton-függvénye (operátora):  $H = H_0 + V$ . A perturbált rendszer sajátfüggvényeinek ki kell elégíteniük az

$$i\hbar \partial \psi / \partial t = (H_0 + V) \psi$$

hullámegyenletet, ahol  $(H_0 + V)$  egy operátor. Ha  $\psi = \sum_r a_r \psi_r$  ezen egyenlet megoldása, amely a megfelelő kezdeti feltételeket kielégíti, ahol  $\psi_r$ -k a perturbálatlan rendszer sajátfüggvényei az  $r$  indexszel jelölt stacionárius állapotban és az  $a_r$ -k csupán az idő függvényei, akkor  $|a_r|^2$  megadja annak valószínűségét, hogy a rendszert tetszőleges időpontban az  $r$  állapotban találjuk. Az  $a_r$ -eknek normáltaknak kell lenniük kezdetben és akkor mindig normáltak is maradnak. Az elmélet közvetlenül alkalmazható  $N$  hasonló, független rendszer sokaságára, ha ezen  $a_r$ -k mindegyikét megszorozzuk  $N^{1/2}$ -nel úgy, hogy  $\sum_r |a_r|^2 = N$  legyen. Azt kapjuk, hogy  $|a_r|^2$  az  $r$  állapotú rendszerek valószínű száma.

Az  $a_r$ -k változási sebességét meghatározó egyenlet:\*

$$i\hbar \dot{a}_r = \sum_s V_{rs} a_s, \quad (4)$$

ahol a  $V_{rs}$ -ek a  $V$ -t reprezentáló mátrix elemei. A konjugált komplex egyenlet:

$$-i\hbar \dot{a}_r^* = \sum_s V_{rs}^* a_s^* = \sum_s a_s^* V_{sr}. \quad (4')$$

Ha  $a_r$ -et és  $i\hbar \dot{a}_r^*$ -ot kanonikusan konjugáltaknak tekintjük, akkor a (4) és (4') egyenletek az  $F_1 = \sum_{rs} a_r^* V_{rs} a_s$  Hamilton-függvénnyel hamiltoni alakot vesznek fel, ugyanis

$$\frac{da_r}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial F_1}{\partial a_r^*}, \quad i\hbar \frac{da_r^*}{dt} = -\frac{\partial F_1}{\partial a_r}.$$

Az

$$a_r = N_r^{1/2} e^{-i\Phi_r/\hbar}, \quad a_r^* = N_r^{1/2} e^{i\Phi_r/\hbar}$$

érintkezési transzformáció segítségével áttérhetünk az  $N_r$  és  $\Phi_r$  kanonikus változókra. Ez a transzformáció az új változókat,  $N_r$ -et és  $\Phi_r$ -et valóssá teszi, mert  $N_r$  egyenlő az  $a_r a_r^* = |a_r|^2$  mennyiséggel, azaz az  $r$  állapotban levő rendszerek valószínű számával és  $\Phi_r/\hbar$  az ezeket képviselő sajátfüggvény fázisa. Az  $F_1$  Hamilton-függvény most ilyen lesz:

$$F_1 = \sum_{rs} V_{rs} N_r^{1/2} N_s^{1/2} e^{i(\Phi_r - \Phi_s)/\hbar}$$

és azon egyenletek kanonikus alakja, amelyek az átmenetek sebességét meghatározzák:

$$\dot{N}_r = -\frac{\partial F_1}{\partial \Phi_r}, \quad \dot{\Phi}_r = \frac{\partial F_1}{\partial N_r}.$$

Arra, hogy az átmeneti egyenleteket hamiltoni alakra hozzuk, kényelmesebb eljárást kapunk a következő mennyiségek segítségével:

$$b_r = a_r e^{-iW_r t/\hbar}, \quad b_r^* = a_r^* e^{iW_r t/\hbar},$$

\* Loc. cit. I.



ahol  $W_r$  az  $r$  állapot energiája. Itt  $|b_r|^2$  egyenlő  $|a_r|^2$ -tel, az  $r$  állapotú rendszerek valószínű számával.  $b_r$ -re vonatkozólag (4) segítségével azt találjuk, hogy

$$ih\dot{b}_r = W_r b_r + ih\dot{a}_r e^{-iW_r t/\hbar} = W_r b_r + \Sigma_s V_{rs} b_s e^{i(W_s - W_r)t/\hbar}.$$

Ha  $V_{rs} = v_{rs} e^{i(W_r - W_s)t/\hbar}$  úgy, hogy állandó, ha  $V$  nem tartalmazza explicit az időt, akkor az egyenlet így egyszerűsödik:

$$ih\dot{b}_r = W_r b_r + \Sigma_s v_{rs} b_s = \Sigma_s H_{rs} b_s, \quad (5)$$

ahol  $H_{rs} = W_r \delta_{rs} + v_{rs}$ , ami a  $H = H_0 + V$  teljes Hamilton-operátor mátrixeleme az  $e^{i(W_r - W_s)t/\hbar}$  időfaktor elhagyásával úgy, hogy  $H_{rs}$  állandó, ha  $H$  nem tartalmazza explicit az időt. Az (5) egyenlet ugyanolyan alakú, mint (4), és ugyanúgy hamiltoni alakra hozható.

Meg kell jegyezni, hogy az (5) egyenletet közvetlenül megkapjuk, ha felírjuk a Schrödinger-egyenletet a perturbálatlan rendszer stacionárius állapotait indexelő változókkal. Ha ezek a változók  $\xi_k$ -k és ha  $H(\xi', \xi'')$  jelöli a teljes  $H$  Hamilton-operátor mátrixelemét a  $(\xi)$  sémában, akkor a Schrödinger-egyenlet:

$$ih\partial\psi(\xi')/\partial t = \Sigma_{\xi''} H(\xi' \xi'') \psi(\xi''), \quad (6)$$

ugyanaz, mint (3'). Ez csak jelölésben különbözik az előző (5) egyenlettől, ott egyetlen  $r$  index használata, itt a  $\xi_k$  változók  $\xi'_k$  numerikus értékeinek sorozata jelöli a stacionárius állapotot és  $b_r$  áll  $\psi(\xi')$  helyett. A (6) és ennél fogva az (5) egyenlet akkor is használható, ha a Hamilton-függvény általánosabb típusú: nem fejezhető ki a kanonikus változók algebrai függvényeként, de reprezentálható a  $H(\xi', \xi'')$  vagy  $H_{rs}$  mátrixszal.

Vegyük  $b_r$ -et és  $ihb_r^*$ -t kanonikusan konjugált változóknak és  $ih a_r^*$  helyett. Az (5) egyenlet és komplex konjugáltja veszi most fel a hamiltoni alakot az

$$F = \Sigma_{rs} b_r^* H_{rs} b_s \quad (7)$$

Hamilton-függvénnyel. Épp úgy eljárva, mint előbb, képezzük a

$$b_r = N_r^{1/2} e^{-i\theta_r/\hbar}, \quad b_r^* = N_r^{1/2} e^{i\theta_r/\hbar} \quad (8)$$

érintkezési transzformációt az  $N_r, \theta_r$  új kanonikus változókra, ahol  $N_r$ , mint előbb, az  $r$  állapotban levő rendszerek valószínű száma és  $\theta_r$  az új fázis. Az  $F$  Hamilton-függvény most:

$$F = \Sigma_{rs} H_{rs} N_r^{1/2} N_s^{1/2} e^{i(\theta_r - \theta_s)/\hbar}$$

és az  $N_r$  és a  $\theta_r$  változási sebességére vonatkozó egyenletek felveszik az

$$\dot{N}_r = -\frac{\partial F}{\partial \theta_r}, \quad \dot{\theta}_r = \frac{\partial F}{\partial N_r}$$

kanonikus alakot.

A Hamilton-függvény így írható:

$$F = \Sigma_r W_r N_r + \Sigma_{rs} v_{rs} N_r^{1/2} N_s^{1/2} e^{i(\theta_r - \theta_s)/\hbar}. \quad (9)$$



Az első  $\Sigma_r W_r N_r$  tag a sokaság teljes sajátenergiája és a második tag úgy tekinthető, mint a perturbációból származó járulékos energia. Ha a perturbáció zéró, akkor a  $\theta_r$  fázisok lineárisan növekednek az idővel, míg a  $\Phi_r$  előző fázisok ebben az esetben állandók lennének.

### 3. § Egy Einstein—Bose-statisztikának eleget tevő sokaság perturbációja

Az előző fejezet szerint a független rendszerek sokaságára ható perturbációt leírhatjuk kanonikus változók és Hamilton-féle mozgásegyenletek segítségével. Az elmélet továbbfejlesztése természetes módon úgy merül fel, hogy kanonikus változóként a szokásos kvantumfeltételeknek eleget tevő  $q$  számok lépnek a  $c$  számok helyébe úgy, hogy Hamilton-féle mozgásegyenleteik igazi kvantumegyenletekké válnak. A Hamilton-féle függvény most egy Schrödinger-féle hullámegyenletet ad, amit a szokásos módon kell megoldani és értelmezni. Az interpretáció nemcsak valamely állapotban levő rendszerek valószínű számát adja meg, hanem a rendszerek különféle állapotok közötti eloszlásának valószínűségét is; ez a valószínűség egyenlő a hullámegyenlet olyan normált megoldása abszolút értékének négyzetével, amely kielégíti a megfelelő kezdeti feltételeket. Persze, kiszámíthatjuk elemi megfontolásokból közvetlenül is bármely adott eloszlás valószínűségét, ha a rendszerek egymástól függetlenek, mivel ismerjük minden egyes rendszer tetszőleges állapotra vonatkozó előfordulási valószínűségét. Azt találjuk, hogy az ilyen módon számított valószínűség nem egyezik meg azzal, amit a hullámegyenletből nyertünk, kivéve azt a speciális esetet, midőn csupán egyetlen rendszer van a sokaságban. Általános esetben ki fogjuk mutatni, hogy a hullámfüggvény bármely adott eloszlás valószínűségére a helyes értéket szolgáltatja, ha a rendszerek az Einstein—Bose-statisztikának engedelmeskednek, ahelyett, hogy függetlenek lennének egymástól.

Feltesszük, hogy a 2. §  $b_r, i\hbar b_r^*$  kanonikus változói oly  $q$  számok, amelyek eleget tesznek a következő kvantumfeltételeknek:

$$b_r, i\hbar b_r^* - i\hbar b_r^* \cdot b_r = i\hbar$$

vagy

$$b_r b_r^* - b_r^* b_r = 1$$

és

$$b_r b_s - b_s b_r = 0, \quad b_r^* b_s^* - b_s^* b_r^* = 0, \quad b_r b_s^* - b_s^* b_r = 0 \quad (s \neq r).$$

A (8) transzformációs egyenleteket most a

$$\left. \begin{aligned} b_r &= (N_r + 1)^{1/2} e^{-i\theta_r/\hbar} = e^{-i\theta_r/\hbar} N_r^{1/2} \\ b_r^* &= N_r^{1/2} e^{i\theta_r/\hbar} = e^{i\theta_r/\hbar} (N_r + 1)^{1/2} \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

kvantumos alakban kell leírni azért, hogy  $N_r, \theta_r$  is kanonikus változók lehessenek. Ezen egyenletek mutatják, hogy  $N_r$ -nek csak zérusnál nem kisebb egész sajátértékei lehetnek,\* ami azon feltevésünk igazolását nyújtja, hogy a változók a választott módon  $q$  számok. A különböző állapotban levő rendszerek száma most rendes kvantumszám.

\* Lásd a szerző „Roy. Soc. Proc.” A, 111, 281, 1926. cikkének 8. §-át. Amit ott egy  $q$  szám  $c$  számértékének hívtunk, azt itt pontosabban eme  $q$  szám sajátértékének nevezzük.



A (7) Hamilton-függvény most:

$$\begin{aligned} F &= \Sigma_{rs} b_r^* H_{rs} b_s = \Sigma_{rs} N_r^{1/2} e^{i\theta_r/h} H_{rs} (N_s + 1)^{1/2} e^{-i\theta_s/h} = \\ &= \Sigma_{rs} H_{rs} N_r^{1/2} (N_s + 1 - \delta_{rs})^{1/2} e^{i(\theta_r - \theta_s)/h} \end{aligned} \quad (11)$$

amelyben a  $H_{rs}$ -ek még mindig  $c$  számok. Ezt az  $F$ -et a (9)-nek megfelelő alakba írhatjuk, ami ismét egy  $\Sigma_r W_r N_r$  sajátenergia-tagból és egy kölcsönhatási energia-tagból tevődik össze.

$$F = \Sigma_r W_r N_r + \Sigma_{rs} v_{rs} N_r^{1/2} (N_s + 1 - \delta_{rs})^{1/2} e^{i(\theta_r - \theta_s)/h} \quad (11')$$

A hullámeqyenlet az  $N_r$  változókkal kifejezve\*

$$ih \frac{\partial}{\partial t} \psi(N'_1, N'_2, N'_3, \dots) = F \psi(N'_1, N'_2, N'_3, \dots) \quad (12)$$

ahol  $F$  egy operátor és mindegyik, az  $F$ -ben előforduló  $\theta_r$  helyett  $ih\partial/\partial N'_r$  áll. Ha az  $e^{\pm i\theta_r/h}$  operátort az  $N'_1, N'_2, \dots$  változók egy tetszőleges  $f(N'_1, N'_2, \dots, N_r, \dots)$  függvényére alkalmazzuk, az eredmény

$$e^{\pm i\theta_r/h} f(N'_1, N'_2, \dots, N'_r, \dots) = e^{\mp \partial/\partial N'_r} f(N'_1, N'_2, \dots, N'_r, \dots) = f(N'_1, N'_2, \dots, N'_r \mp 1, \dots)$$

lesz. Ha ezt a szabályt a (12) egyenletben alkalmazzuk és  $F$ -re a (11) kifejezést használjuk, akkor ezt kapjuk:\*\*

$$ih \frac{\partial}{\partial t} \psi(N'_1, N'_2, N'_3, \dots) = \Sigma_{rs} H_{rs} N_r^{1/2} (N'_s + 1 - \delta_{rs})^{1/2} \psi(N'_1, N'_2, \dots, N'_r - 1, \dots, N'_s + 1, \dots). \quad (13)$$

Ezen egyenlet jobb oldaláról látjuk, hogy az  $F$ -et ábrázoló mátrixban az  $F$ -ben levő  $e^{i(\theta_r - \theta_s)/h}$ -t tartalmazó kifejezés csupán azokra az átmenetekre vonatkozó mátrixelemekhez ad járulékot, ahol  $N_r$  eggyel fogy és  $N_s$  eggyel nő, azaz az  $F(N'_1, N'_2, \dots, N'_r, \dots, N'_s, N'_1, N'_2, \dots, N'_r - 1, \dots, N'_s + 1, \dots)$  típusú mátrixelemekhez. Ha a (13) egyenletnek egy  $\psi(N'_1, N'_2, \dots)$  megoldása normálva van [azaz  $\Sigma_{N'_1, N'_2, \dots} |\psi(N'_1, N'_2, \dots)|^2 = 1$ ] és eleget tesz a kezdeti feltételeknek, akkor  $|\psi(N'_1, N'_2, \dots)|^2$  annak az eloszlásnak valószínűsége, amelyben  $N$  rendszer az 1,  $N$  a 2 állapotban van bármely időpontban.

Tekintsük először azt az esetet, ahol csupán egy rendszer van a sokaságban. Annak valószínűségét, hogy ez a  $q$  állapotban van, a  $\psi(N'_1, N'_2, \dots)$  sajátfüggvény határozza meg, amelyben minden  $N'$ -t zérussal tesszük egyenlővé, kivéve  $N'_q$ -t, amit az egységnek veszünk. Ezt a sajátfüggvényt  $\psi\{q\}$ -val jelöljük. Ha ezt behelyettesítjük a (13) bal oldalába, a jobb oldalon levő összeg minden tagja eltűnik, kivéve azokat, amelyekre  $r=q$  és azt kapjuk, hogy

$$ih \frac{\partial}{\partial t} \psi\{q\} = \Sigma_r H_{qs} \psi\{s\},$$

\* A határozottság kedvéért feltesszük, hogy a stacionárius állapotok  $r$  indexe az 1, 2, 3, ... értékeket veszi fel.

\*\* Ha  $s=r$ , akkor  $\psi(N'_1, N'_2, \dots, N'_r - 1, \dots, N'_s + 1) \psi(N'_1, N'_2, \dots, N'_r, \dots)$ -t jelenti.



ami (5)-tel egyező egyenlet, a  $b_q$  szerepét  $\psi\{q\}$  játssza. Innen következik, hogy a jelen elmélet egyenértékű az előző fejezetével, ha csupán egyetlen rendszer van a sokaságban.

Most vegyük az általános esetet: tetszőleges számú rendszer van a sokaságban és feltesszük, hogy ezek Einstein—Bose-statisztikának engedelmeskednek. Ez megköveteli, hogy — a probléma rendes tárgyalásában — csak azokat a sajátfüggvényeket kell számításba venni, amelyek szimmetrikusak a rendszerek felcserélésével szemben, ugyanis ezek a sajátfüggvények már önmagukban elégségesek arra, hogy a feladatnak teljes kvantumos megoldását adják.\* Most előállítjuk eme szimmetrikus sajátfüggvények egyikének változási sebességére vonatkozó egyenletet és megmutatjuk, hogy ez azonos a (13) egyenlettel.

Ha a rendszereket egy  $n$  számmal indexeljük, akkor a sokaság Hamilton-operátora  $H_A = \sum_n H(n)$  lesz, ahol  $H(n)$  a második §  $H$ -ja (ami egyenlő  $H_0 + N$ -vel) az  $n$ -edik rendszer változóival kifejezve. A sokaság egy stacionárius állapotát az  $r_1, r_2, \dots, r_n \dots$  számok határozzák meg, amelyek azon stacionárius állapotok sor-számai, amelyekben a szeparált rendszerek találhatók. A sokaság Schrödinger-egyenlete olyan változókkal kifejezve, melyek stacionárius állapotokat jellemzik a (6) alakot veszi fel ( $H_A$ -val a  $H$  helyett) és felírhatjuk a (5) jelölésével így:

$$ih\dot{b}(r_1 r_2 \dots) = \sum_{s_1, s_2} \dots H_A(r_1 r_2 \dots; s_1 s_2 \dots) b(s_1 s_2 \dots), \quad (14)$$

ahol  $H_A(r_1, r_2, \dots; s_1, s_2, \dots)$  a  $H$  általános mátrixeleme (az időtényező kihagyásával). Ez a mátrixelem eltűnik, ha egynél több  $s_n$  különbözik a megfelelő  $r_n$ -tól; egyenlő  $H_{rs}$ -val, ha  $s_m$  különbözik  $r_m$ -tól és minden más  $s_n$  egyenlő  $r_n$ -nel: és  $\sum_n H_{r_n r_n}$ -rel egyenlő, ha minden egyes  $s_n$  egyenlő  $r_n$ -nel. Ezeket az értékeket a (14)-be helyettesítve kapjuk, hogy

$$ih\dot{b}(r_1 r_2 \dots) = \sum_m \sum_{s_m \neq r_m} H_{r_m s_m} b(r_1 r_2 \dots r_{m-1} s_m r_{m+1} \dots) + \sum_n H_{r_n r_n} b(r_1 r_2 \dots). \quad (15)$$

Szorítkozzunk most arra az esetre, amikor  $b(r_1 r_2 \dots)$  az  $r_1, r_2 \dots$  változók szimmetrikus függvénye, avéggől, hogy megkapjuk az Einstein—Bose-statisztikát. Ez megengedett, mivel, ha  $b(r_1 r_2 \dots)$  valamely időpontban szimmetrikus, akkor a (15) egyenlet mutatja, hogy  $b(r_1 r_2 \dots)$  is szimmetrikus ebben az időpontban, tehát  $b(r_1 r_2 \dots)$  szimmetrikus marad.

Jelölje  $N_r$  az  $r$  állapotban levő rendszerek számát. Ekkor a sokaság egy szimmetrikus sajátfüggvénnyel leírható stacionárius állapota ugyanúgy jellemezhető az  $N_1, N_2, \dots$  számokkal, mint az  $r_1, r_2 \dots$  számokkal és a (15) egyenletet át tudjuk alakítani az  $N_1, N_2, \dots$  változókra. Az új  $b(N_1, N_2, \dots)$  sajátfüggvényt nem vehetjük egyenlőnek az előző  $b(r_1, r_2 \dots)$  sajátfüggvénnyel, hanem a kettőt egymás számszorosának kell választanunk, hogy mindegyik helyesen normálható legyen a megfelelő változóira vonatkozóan. Pontosabban, fennáll, hogy

$$\sum_{r_1, r_2} \dots |b(r_1 r_2 \dots)|^2 = 1 = \sum_{N_1, N_2} \dots |b(N_1 N_2 \dots)|^2$$

és ennél fogva  $|b(N_1 N_2 \dots)|^2$  egyenlő kell hogy legyen a  $|b(r_1 r_2 \dots)|^2$ -ek összegével az  $r_1, r_2, \dots$  számok minden olyan értékére, hogy közülük  $N_1$  1-gyel,  $N_2$  2-vel egyenlő stb. Ebben az összegben  $N!/N_1!N_2! \dots$  tag van, ahol  $N = \sum_r N_r$  a rendszerek

\* Loc. cit., I. 3. §.



száma; ezek mind egyenlőek, mivel  $b(r_1, r_2, \dots)$  a változóinak,  $r_1, r_2, \dots$ -nek szimmetrikus függvénye. Ennélfogva

$$b(N_1, N_2, \dots) = (N!/N_1!N_2!\dots)^{1/2} b(r_1 r_2 \dots).$$

Ha ezt a helyettesítést a (15) egyenletben elvégezzük, a bal oldal  $ih(N_1!N_2!\dots/N!)^{1/2} b(N_1, N_2, \dots)$  lesz. A  $H_{r_m s_m} b(r_1 r_2 \dots r_{m-1} s_m r_{m+1} \dots)$  kifejezés a jobb oldali első összegben

$$[N_1!N_2!\dots(N_r-1)!\dots(N_s+1)!\dots/N!]^{1/2} H_{rs} b(N_1, N_2, \dots, N_r-1 \dots N_s+1 \dots) \quad (16)$$

lesz, ahol  $r$ -et írtunk  $r_m$  helyett és  $s$ -et  $s_m$  helyett. Ezt a kifejezést összegezni kell  $s$  minden értékére,  $r$ -et kivéve és azután összegezni kell  $r$  szerint, amely fölveszi az  $r_1, r_2 \dots$  értékek mindegyikét. Így az összegezési eljárással (16) minden egyes tagja összesen  $N_r$ -szer megismétlődik úgy, hogy

$$\begin{aligned} N_r [N_1!N_2!\dots(N_r-1)!\dots(N_s+1)!\dots/N!]^{1/2} H_{rs} b(N_1, N_2, \dots, N_r-1, \dots, N_s+1, \dots) = \\ = N_r^{1/2} (N_s+1)^{1/2} (N_1!N_2!\dots/N!)^{1/2} H_{rs} | + b(N_1, N_2, \dots, N_r-1 \dots N_s+1 \dots) \end{aligned}$$

járulékot ad a (15) jobb oldalához. Végül a  $\sum_n H_{r_n r_n} b(r_1, r_2, \dots)$  tagból

$$\sum_r N_r H_{rr} \cdot b(r_1 r_2 \dots) = \sum_r H_r H_{rr} \cdot (N_1!N_2!\dots/N!)^{1/2} b(N_1, N_2 \dots)$$

lesz. Ennélfogva (15) egyenlet a  $(N_1!N_2!\dots/N!)^{1/2}$  tényező elhagyásával így írható:

$$\begin{aligned} ihb(N_1, N_2 \dots) = \sum_r \sum_{s \neq r} N_r^{1/2} (N_s+1)^{1/2} H_{rs} b(N_1, N_2 \dots, N_r-1 \dots N_s+1 \dots) + \\ + \sum_r N_r H_{rr} b(N_1, N_2 \dots), \end{aligned} \quad (17)$$

ami azonos (13)-mal — eltekintve attól a ténytől, hogy (17)-ben a  $N'$ -kről a vesszőket elhagytuk; ez megengedhető, ha nem kell  $N'$ -kre mint  $q$  számokra hivatkozni —. Így megállapítottuk, hogy (11) Hamilton-operátor leírja egy perturbáció hatását az Einstein—Bose-statisztikának eleget tevő sokaságra.

#### 4. §. A sokaság visszahatása a perturbáló rendszerre

Eddig csak olyan perturbációkkal foglalkoztunk, amelyek a perturbált rendszer Hamilton-operátorához adott  $V$  perturbációs energiával írhatók le, ahol ez utóbbi csak ennek a rendszernek dinamikai változóitól és esetleg az időtől függ. Az elmélet könnyen kiterjeszthető arra az esetre, ha a perturbáció egy perturbáló dinamikus rendszerrel való kölcsönhatásból áll, számításba véve a perturbált rendszer visszahatását a perturbáló rendszerre. (Ez a megkülönböztetés a perturbáló és a perturbált rendszer között természetesen nem reális, de kényelmessége miatt fenn fogjuk tartani.)

Tekintsünk most egy  $J_k, \omega_k$  kanonikus változókkal leírt perturbáló rendszert, amelynek  $J$ -k első integráljai, ha egyedül áll, és hasson ez kölcsönös egymáshatás nélküli perturbált rendszerek sokaságával, melyek az Einstein—Bose-statisztikának tesznek eleget. A teljes Hamilton-operátor a következő alakú lesz:

$$H_T = H_P(J) + \sum_n H(n),$$



ahol  $H_p$  a perturbáló rendszer Hamilton-operátora (csak  $J$ -k függvénye) és  $H(n)$  a sokaság  $n$ -edik rendszerének  $V(n)$  perturbációs energiájával megnövelt  $H(n)$  sajátenergia.  $H(n)$  csupán a sokaság  $n$ -edik rendszerének változóitól és a  $J_k$  és  $\omega_k$  változóktól függ és nem tartalmazza explicite az időt.

A Schrödinger-egyenlet a (14) egyenletnek megfelelően most

$$ih\dot{b}(J', r_1 r_2 \dots) = \Sigma_{J''} \Sigma_{s_1, s_2} \dots H_T(J', r_1 r_2 \dots; J'', s_1 s_2 \dots) b(J'', s_1 s_2 \dots),$$

amelyben a  $b$  sajátfüggvény magában foglalja a  $J'_k$  járulékos változókat a  $H_T(J', r_1 r_2 \dots; J'', s_1 s_2 \dots)$  mátrixelem most mindig állandó. Ugyanúgy, mint előbb, eltűnik, ha több, mint egy  $s_n$  különbözik a megfelelő  $r_n$ -től. Ha  $s_m$  különbözik  $r_m$ -től és minden más  $s_n$  egyenlő  $r_n$ -nel, akkor ez a mátrixelem  $H(J'r_m; J''s_m)$ -re redukálódik, mely  $H=H_0+V$ -nek  $(J'r_m; J''s_m)$  mátrixeleme (az időtényező elhagyásával), itt  $H$  a sokaság egyetlen rendszere sajátenergiájának és a perturbációs energiának összege; mikor pedig minden  $s_n$  egyenlő  $r_n$ -nel, értéke:  $H(J')\delta_{J'J''} + \Sigma_n H(J'r_n; J''r_n)$ . Ha úgy mint előbb azt a megszorítást tesszük, hogy a sajátfüggvény az  $r_1, r_2, \dots$  változóiban szimmetrikus, akkor ismét az  $N_1, N_2 \dots$  változókra térhetünk át, ami úgy mint az előbb, az alábbi eredményre vezet:

$$ih\dot{b}(J', N_1, N_2' \dots) = H_p(J')b(J', N_1', N_2' \dots) + \quad (18)$$

$$+ \Sigma_{J''} \Sigma_{r,s} N_r^{1/2} (N_s' + 1 - \delta_{rs})^{1/2} H(J'r; J''s) b(J'', N_1', N_2', \dots, N_r' - 1 \dots N_s' + 1 \dots).$$

Ez a Schrödinger-egyenlet a következő Hamilton-függvénynek felel meg:

$$F = H_p(J) + \Sigma_{r,s} H_{rs} N_r^{1/2} (N_s + 1 - \delta_{rs})^{1/2} e^{i(\theta_r - \theta_s)/h} \quad (19)$$

amelyben  $H_{rs}$  most a  $J'$ -k és  $\omega'$ -k függvénye, ha pedig  $(J)$  sémában mátrixszal ábrázoljuk,  $(J'J'')$  eleme  $H(J'r; J''s)$  lesz. (Meg kell jegyeznünk, hogy  $H_{rs}$  továbbra is kommutál az  $N'$ -kel és  $\theta'$ -kel.)

Így egy perturbáló rendszer és egy Einstein—Bose-statisztikát kielégítő sokaság egymásrahatása (19) alakú Hamilton-függvénnyel írható le. Ez a (11')-nek megfelelő alakra hozható azzal a megjegyzéssel, hogy a  $H(J'r; J''s)$  mátrixelem két rész összegéből áll. Az egyik rész, amely a  $H_0$  sajátenergiából származik és  $W_r$ -rel egyenlő, ha  $J''=J'_k$  és  $s=r$ , egyébként eltűnik; a másik rész, amely a kölcsönhatás  $v$  energiájából származik és  $v(J'r; J''s)$ -vel jelölhető. Így kapjuk, hogy

$$H_{rs} = W_r \delta_{rs} + v_{rs},$$

ahol  $v_{rs}$  a  $J'$ -k és  $\omega'$ -k azon függvénye, melyet az a mátrix ábrázol, melynek  $(J'J'')$  eleme  $v(J'r; J''s)$  és így a (19) következőképpen alakul:

$$F = H_p(J) + \Sigma_r W_r N_r + \Sigma_{r,s} v_{rs} N_r^{1/2} (N_s + 1 - \delta_{rs})^{1/2} e^{i(\theta_r - \theta_s)/h}. \quad (20)$$

Tehát a Hamilton-függvény a perturbáló rendszer  $H_p(J)$  sajátenergiája, a perturbált rendszer  $\Sigma_r W_r N_r$  sajátenergiája és a  $\Sigma_{rs} v_{rs} N_r^{1/2} (N_s + 1 - \delta_{rs})^{1/2} e^{i(\theta_r - \theta_s)/h}$   $n$  perturbációs energia összegéből áll.



### 5. §. Egy rendszer azonos energiájú állapotai között fellépő átmenetek elmélete

Mielőtt az előző fejezet eredményeit fénykvantumokra alkalmaznánk, megvizsgáljuk a (19) típusú Hamilton-függvénnyel jellemzett probléma megoldását. A probléma lényeges tulajdonsága, hogy olyan dinamikai rendszerre vonatkozik, amely egy perturbációs energia hatására — mely az időt explicite nem tartalmazza — egyik állapotból más, azonos energiájú állapotokba mehet át. Egy atomi rendszer és egy elektron ütközésének problémája, melyet Born\* tárgyal, ennek a típusnak speciális esete. Born eljárása az, hogy a hullámegyenletnek olyan *periodikus* megoldását keresi, amely — az ütköző elektron koordinátáit tekintve — a rendszerhez közeledő beeső elektront képviselő síkhullámokból áll, melyek szóródnak, vagy elhajlanak minden irányban. Bármely irányban valamely frekvenciával szórt hullámok amplitúdójának négyzete Born feltételezése szerint megadja az elektron szóródásának valószínűségét ebben az irányban a megfelelő energiával.

Ez az eljárás nem látszik alkalmasnak arra, hogy valamilyen egyszerű módon kiterjesszük olyan rendszerek általános problémájára, melyek egy állapotból azonos energiájú más állapotokba mennek át. Jelenleg nincs is igazán közvetlen és biztos mód egy hullámegyenlet periodikus megoldásának olyan értelmezésére, melyet egy nem periodikus fizikai jelenségre, mint az ütközés, alkalmazni lehetne. (A most következő sokkal biztosabb módszer megmutatja, hogy Born feltevése nem teljesen helyes, mivel az amplitúdó négyzetét egy bizonyos tényezővel meg kell szorozni.)

Egy másik módja az ütközési probléma megoldásának az, hogy találjunk a hullámegyenlet számára olyan *nem periodikus* megoldást, mely kezdetben az egész téren át a szükséges irányban a szükséges frekvenciával mozgó síkhullámokkal írja le a beeső elektront. Az idő folyamán más irányban mozgó hullámoknak is meg kell jelenniük, hogy a hullámegyenlet kielégítve maradhasson. Az elektron szóródásának valószínűségét valamely irányban valamely energiával, ekkor e hullámok megfelelő harmonikus komponensének növekedési sebessége határozza meg. Ezzel a módszerrel a matematikai eljárás értelmezése teljesen meghatározott, mivel ugyanaz, mint a második paragrafus elején.

Ezt a módszert fogjuk alkalmazni egy olyan rendszer általános problémájára, amely egyik állapotból perturbáció hatására más, azonos energiájú állapotba kerül. Legyen  $H_0$  a perturbálatlan rendszer Hamilton-függvénye és  $V$  a perturbáló energia, amely ne tartalmazza explicite az időt. Ha a stacionárius állapotok folytonos együttesét vesszük, megkülönböztető változóként a perturbálatlan mozgás  $\alpha_k$  első integráljait használva, akkor a 2. § módszerét követve nyerjük

$$i\hbar a(\alpha') = \int V(\alpha' \alpha'') d\alpha'' \cdot a(\alpha''), \quad (21)$$

a (4) egyenletnek megfelelően. Annak valószínűsége, hogy a rendszer olyan állapotban van, amelyre minden  $\alpha_k$   $\alpha'_k$  és  $\alpha'_k + d\alpha'_k$  között fekszik, tetszőleges időpontban  $|a(\alpha')|^2 d\alpha_1 d\alpha_2 \dots$ , ha  $a(\alpha')$  megfelelően normált és eleget tesz a megfelelő kezdeti feltételeknek. Ha a rendszer kezdetben  $\alpha^0$  állapotban van, akkor  $a(\alpha')$  kezdeti értékét  $a^0 \delta(\alpha' - \alpha^0)$  alakúnak vesszük.  $a^0$ -t szabadon hagyjuk, mivel a jelen eset-

\* Born, „Z. f. Physik”, 38, 803, 1926.



ben  $a(\alpha')$  normálása kényelmetlen lenne. Első közelítésre  $a(\alpha'')$  helyett a (21) egyenlet jobb oldalának kezdeti értékét vehetjük. Ezzel

$$i\hbar \dot{a}(\alpha') = a^0 V(\alpha' \alpha^0) = \alpha^0 v(\alpha' \alpha^0) e^{i[W(\alpha') - W(\alpha^0)]t/\hbar},$$

ahol  $v(\alpha', \alpha^0)$  állandó és  $W(\alpha')$  az  $\alpha'$  állapot energiája. Innen:

$$i\hbar a(\alpha') = a^0 \delta(\alpha' - \alpha^0) + a^0 v(\alpha' \alpha^0) \frac{e^{i[W(\alpha') - W(\alpha^0)]t/\hbar} - 1}{i[W(\alpha') - W(\alpha^0)]/\hbar}. \quad (22)$$

$\alpha'_k$  olyan értékeire, ahol  $W(\alpha')$  jelentősen különbözik  $W(\alpha^0)$ -tól,  $a(\alpha')$  az idő periodikus függvénye, melynek amplitúdója kicsi, ha a perturbáló  $V$  energia kicsi, úgy, hogy az ezen stacionárius állapotoknak megfelelő sajátfüggvények nincsenek jelentősen gerjesztve. Másrészt  $\alpha'_k$  oly értékeire, ahol  $W(\alpha') = W(\alpha^0)$  és  $\alpha'_k \neq \alpha_k^0$  bizonyos  $k$ -ra,  $a(\alpha')$  az idővel egyenletesen növekszik úgy, hogy annak valószínűsége, hogy a rendszer  $\alpha'$  állapotban legyen, mindig az idő négyzetével arányosan nő. Fizikailag annak valószínűsége, hogy a rendszer pontosan ugyanolyan sajátenergiájú állapotban legyen, mint a kezdeti  $W(\alpha^0)$  sajátenergia, nem bír jelentőséggel, lévén végtelen kicsi. Bennünket csak a valószínűség integrálja érdekel, a sajátenergia-értékeknek a kezdeti sajátenergia körüli kis tartományra, amely mint látni fogjuk, az idővel lineárisan nő a közönséges valószínűségi törvényeknek megfelelően.

Áttérünk az  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$  változókról olyan változók sorozatára, amelyek az  $\alpha'$ -k tetszőleges függvényei úgy, hogy egyikük a  $W$  sajátenergia legyen, s így a változók  $W, \gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{n-1}$ . Annak valószínűsége minden időben, hogy a rendszer olyan stacionárius állapotban legyen, amelyre nézve minden  $\gamma_k$ , a  $\gamma'_k$  és  $\gamma'_k + d\gamma'_k$  között fekszik, ekkor (eltekintve a normáló tényezőtől)

$$d\gamma'_1 d\gamma'_2 \dots d\gamma'_{n-1} \int |a(\alpha')|^2 \frac{\partial(\alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_n)}{\partial(W', \gamma'_1, \gamma'_2, \dots, \gamma'_{n-1})} dW'. \quad (23)$$

Olyan időre, amely a rendszer periódusaival összehasonlítva nagy, azt találjuk, hogy gyakorlatilag az egész a (23)-ban szereplő integrált  $W'$ -nek  $W^0 = W(\alpha^0)$ -hoz igen közeli értékei határozzák meg. Legyen

$$a(\alpha') = a(W', \gamma') \quad \text{és} \quad \partial(\alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_n) / \partial(W', \gamma'_1, \gamma'_2, \dots, \gamma'_{n-1}) = J(W', \gamma').$$

Ekkor a (23) integrálra (22) felhasználásával (feltéve, hogy bizonyos  $k$ -kra  $\gamma'_k \neq \gamma_k^0$ ) nyerjük, hogy

$$\begin{aligned} & \int |a(W', \gamma')|^2 J(W', \gamma') dW' = \\ & = |a^0|^2 \int |v(W', \gamma'; W^0, \gamma^0)|^2 J(W', \gamma') \frac{[e^{i(W' - W^0)t/\hbar} - 1][e^{-i(W' - W^0)t/\hbar} - 1]}{(W' - W^0)^2} dW' = \\ & = 2|a^0|^2 \int |v(W', \gamma'; W^0, \gamma^0)|^2 J(W', \gamma') [1 - \cos(W' - W^0)t/\hbar] / (W' - W^0)^2 dW' = \\ & = 2|a^0|^2 t/\hbar \cdot \int |v(W^0 + \hbar x/t, \gamma'; W^0, \gamma^0)|^2 J(W^0 + \hbar x/t, \gamma') (1 - \cos x) / x^2 \cdot dx, \end{aligned}$$



ha a  $(W' - W^0)t/h = x$  helyettesítést elvégezzük. Ez  $t$  nagy értékeire így redukálódik:

$$2|a^0|^2 t/h \cdot |v(W^0, \gamma'; W^0, \gamma^0)|^2 J(W^0, \gamma') \int_{-\infty}^{\infty} (1 - \cos x)/x^2 \cdot dx = \\ = 2\pi |a^0|^2 t/h_r |v(W^0, \gamma'; W^0, \gamma^0)|^2 J(W^0, \gamma').$$

Egy olyan állapotba való átmenet időegységre vonatkoztatott valószínűsége, melyre minden  $\gamma_k$  a  $\gamma'_k$  és  $\gamma'_k + d\gamma'_k$  közé esik (eltekintve a normáló tényezőtől):

$$2\pi |a^0|^2/h \cdot |v(W^0, \gamma'; W^0, \gamma^0)|^2 J(W^0, \gamma') d\gamma'_1 \cdot d\gamma'_2 \dots d\gamma'_{n-1}, \quad (24)$$

ami arányos a perturbáló energia ezen átmenethez tartozó mátrixelemének négyzetével.

Ennek az eredménynek egy egyszerű ütközési problémára való alkalmazása céljából tekintsük az  $\alpha$ -kat az ütköző elektron  $p_x, p_y, p_z$  impulzuskomponenseinek és legyenek a  $\gamma'$ -k a mozgás irányát meghatározó  $\theta$  és  $\varphi$  szögek. Ha számításba vesszük a sebességgel kapcsolatos relativisztikus tömegváltozást és  $P$ -vel jelöljük az elektron  $(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{1/2}$  impulzusértékét és  $E$ -vel az energiáját, ami  $(m^2 c^4 + P^2 c^2)^{1/2}$ -vel egyenlő, ahol  $m$  az elektron nyugalmi tömege, akkor a Jacobi-féle determinánsra nyerjük:

$$J = \frac{\partial(p_x, p_y, p_z)}{\partial(E, \theta, \Phi)} = \frac{EP}{c^2} \sin \theta.$$

Így a (24) kifejezésben  $J(W^0, \gamma')$  értéke

$$J(W^0, \gamma') = E' P' \sin \theta' / c^2, \quad (25)$$

ahol  $E'$  és  $P'$  a szórt elektron energiájának arra az értékére vonatkozik, mely a teljes energiát a kezdeti  $W^0$  energiával teszi egyenlővé (azaz avval az értékkel, amelyet az energia megmaradása követel).

Most  $a(\alpha')$  kezdeti értékét kell értelmeznünk, nevezetesen  $a^0 \delta(\alpha' - \alpha^0)$ -t, amelyet nem normáltunk. A 2. § szerint a hullámfüggvény  $\alpha_k$  változóiban kifejezve  $b(\alpha') = a(\alpha') e^{-iW't/h}$  úgy, hogy kezdeti értéke

$$a^0 \delta(\alpha' - \alpha^0) e^{-iW't/h} = a^0 \delta(p'_x - p_x^0) \delta(p'_y - p_y^0) \delta(p'_z - p_z^0) e^{-iW't/h}.$$

Ha alkalmazzuk az

$$(x'/P') = (2\pi h)^{-3/2} e^{i\Sigma_{xyz} p_x^0 x'/h}$$

transzformációs függvényt\* és a

\* Az  $x$  szimbólumot rövidség kedvéért használjuk  $x, y, z$  jelölésére.

$$\psi(x') = \int (x'/p') \psi(p') dp'_x dp'_y dp'_z$$

transzformációs szabályt, akkor a kezdeti hullámfüggvényre  $x, y, z$  koordinátákban az alábbi értéket kapjuk:

$$a^0 (2\pi h)^{-3/2} e^{i\Sigma_{xyz} p_x^0 x'/h} e^{-iW't/h}.$$

Ez megfelel olyan kezdeti eloszlásnak, amelyben térfogategységenként  $|a^0|^2 (2\pi h)^{-3}$  elektron foglal helyet. Mivel sebességük  $P^0 c^2/E^0$ , időegység alatt a felületegységre



mozgásirányukra merőlegesen történő becsapódások száma:  $|a^0|^2 P^0 c^2 / (2\pi h)^3 E^0$ . Evvel osztva a (24) kifejezést és felhasználva (25)-öt, nyerjük, hogy

$$4\pi^2 (2\pi h)^2 \frac{E' E^0}{c^2} |v(p'; p^0)|^2 \frac{P'}{P^0} \sin \theta' d\theta' d\Phi'. \quad (26)$$

Ez az az effektív terület, melyre az elektronnak becsapódnia kell, hogy  $\sin \theta' d\theta d\varphi'$  térszögben  $E'$  energiával szóródjék. Ez az eredmény  $(2\pi h)^2 / 2mE' / 2mE', P'/P^0$  tényezőben különbözik Bornétól\*. A  $P'/P^0$  tényező szükségességét a (26)-ban a részletes egyensúly elvéből meg lehetett volna jóslani, mivel a  $|v(p'; p^0)|^2$  tényező szimmetrikus a közvetlen és a fordított folyamatra nézve.\*\*

## 6. §. Alkalmazás fénykvantumokra

Most alkalmazzuk a 4. §-ban kifejtett elméletet arra az esetre, ha a sokaság rendszerei fénykvantumok. Az elmélet erre az esetre alkalmazható, mivel a fénykvantumok kielégítik az Einstein—Bose-statisztikát és nincsenek kölcsönös egymáshatásban. Egy fénykvantum stacionárius állapotban van, ha állandó impulzussal egyenes vonalban mozog. Így egy  $r$  stacionárius állapotot az impulzus három komponense és egy, a polarizációs állapotot jellemző változó határoz meg. Azzal a feltevéssel dolgozunk, hogy véges számú ilyen stacionárius állapot létezik, egymáshoz igen közel, mivel kényelmetlen volna folytonos sorozat használata. A fénykvantumoknak egy atomi rendszerrel való kölcsönhatását egy (20) alakú Hamilton-operátor írja le, melyben  $H_p(J)$  egyedül az atomi rendszerre vonatkozó operátor és a  $v_{rs}$  együttthatók egyelőre ismeretlenek. Kimutatjuk, hogy a Hamilton-operátor ezen alakja az önkényesen választott  $v_{rs}$ -sel Einsteinnek a sugárzás emissziójára és abszorpciójára vonatkozó törvényeire vezet.

A fénykvantumnak sajátja, hogy látszólag megszűnik, ha egyik stacionárius állapotában, nevezetesen a zéró állapotban van, melyben impulzusa és energiája is zéró. Ha egy fénykvantum abszorbeálódik, akkor ez úgy tekinthető, hogy ebbe a zéró állapotba ugrik és az emittálódás úgy tekinthető, hogy a zéró állapotból ugrik olyan állapotba, melyben fizikailag megnyilvánul, mintha teremtnének. Mivel az így létrejött fénykvantumok számának nincs korlátja, fel kell tételeznünk, hogy végtelen sok fénykvantum van zéró állapotban úgy, hogy a (20) Hamilton-operátor  $N_0$ -ja végtelen. Most meg kell határoznunk  $\theta_0$ -át, a  $N_0$ -hoz kanonikusan konjugált változót; ez állandó, mivel  $\dot{\theta}_0 = \partial F / \partial N_0 = W_0 + N_0^{-1/2}$ -t vagy  $(N_0 + 1)^{-1/2}$ -t tartalmazó tagok és  $W_0$  zéró. Ahhoz, hogy a (20) Hamilton-operátor véges maradjon, szükséges, hogy a  $v_{rs}, v_{0r}$  együttthatók végtelenül kicsik legyenek. Feltesszük, hogy úgy lesznek végtelenül kicsinyek, hogy  $v_{r0} N_0^{1/2}$  és  $v_{0r} N_0^{1/2}$  véges legyen, azért, hogy az átmeneti valószínűségi együttthatók végesek lehessenek. Így írjuk, hogy

$$v_{r0} (N_0 + 1)^{1/2} e^{-i\theta_0/\hbar} = v_r, \quad v_{0r} N_0^{1/2} e^{i\theta_0/\hbar} = v_r^*,$$

\* Egy újabb cikkében („Nachr. Gesell. d. Wiss.”, Göttingen. 146, 1926.) Born egy a megmaradás elvén alapuló analízis alkalmazásával olyan eredményt kapott, mint a jelen cikk a nem-relativisztikus mechanika esetében. Le vagyok kötelezve N. Bohr professzornak e munka első lenyomatának átnézéséért.

\*\* Lásd Klein és Rosseland „Z. f. Physik”, 4, 46, 1921, (4) egyenlet.



ahol  $v_r$  és  $v_r^*$  véges és konjugált komplex mennyiségek. Úgy tekinthetjük, hogy  $v_r$  és  $v_r^*$  csak az atomi rendszer  $J$ -inek és  $\omega$ -inak függvényei, minthogy  $(N_0 + 1)^{1/2} e^{-i\theta_0/h}$  és  $N_0^{1/2} e^{+i\theta_0/h}$  tényezők gyakorlatilag állandók.  $N_0$  megváltozása  $N_0$ -lal összevetve igen csekély. A (20) Hamilton-operátor ekkor

$$F = H_p(J) + \Sigma_r W_r N_r + \Sigma_{r \neq 0} [v_r N_r^{1/2} e^{i\theta_r/h} + v_r^* (N_r + 1)^{1/2} e^{-i\theta_r/h}] + \quad (27)$$

$$+ \Sigma_{r \neq 0} \Sigma_{s \neq 0} v_{rs} N_r^{1/2} (N_s + 1 - \delta_{rs})^{1/2} e^{i(\theta_r - \theta_s)/h}.$$

Egy olyan átmenet valószínűsége, amelyben egy  $r$  állapotú fénykvantum abszorbeálódik, arányos a Hamilton-operátor ezen átmenetre vonatkozó mátrixeleme abszolút értékének négyzetével. Ennek a mátrixelemnek a Hamilton-operátor  $v_r N_r^{1/2} e^{i\theta_r/h}$  tagjából kell adódnia és ezért arányosnak kell lennie  $N_r'^{1/2}$ -vel, ahol  $N_r'$  az  $r$  állapotú fénykvantumok száma a folyamat előtt. Az elnyelési folyamat valószínűsége tehát arányos  $N_r'$ -vel. Ugyanúgy egy  $r$  állapotú fénykvantum kibocsátásának valószínűsége  $(N_r' + 1)$ -gyel arányos, és egy  $r$  állapotú fénykvantum  $s$  állapotba való szóródásának valószínűsége  $N_r'(N_s' + 1)$ -gyel arányos. Az Einstein és Ehrenfest\* által tárgyalt általánosabb típusú sugárzási folyamatokat, melyekben egyidejűleg egynél több fénykvantum vesz részt, a jelen elmélet kizárja.

Hogy összefüggést állapítsunk meg a stacionárius állapotokénti fénykvantumok száma és a sugárzás intenzitása között, tekintsünk egy véges, mondjuk  $A$  térfogatú térrészt, amely a sugárzást tartalmazza. Adott polarizáltságú fénykvantumokra, melyek frekvenciája  $v_r$ -től  $v_r + dv_r$ -ig terjed, amelyek mozgásiránya  $d\omega_r$  térszögben fekszik az  $r$  állapotra jellemző mozgásirány körül, a stacionárius állapotok száma  $Av_r^2 dv_r d\omega_r / c^3$  lesz. A fénykvantumok energiája ezekben a stacionárius állapotokban tehát:  $N_r' 2\pi h v_r Av_r^2 dv_r d\omega_r / c^3$ . Ennek egyenlőnek kell lennie  $Ac^{-1} I_r dv_r d\omega_r$ -vel, ahol  $I_r$  az  $r$  állapot körüli egységnyi frekvenciatartományra eső intenzitás. Innen

$$I_r = N_r' (2\pi h) v_r^3 / c^2 \quad (28)$$

úgy, hogy  $N_r'$  arányos  $I_r$ -rel és  $N_r' + 1$  arányos  $I_r + (2\pi h) v_r^3 / c^2$ -tel. Így azt kapjuk, hogy egy abszorpciósi folyamat valószínűsége arányos az egységnyi frekvenciatartományra vonatkozó beeső intenzitással,  $I_r$ -vel, az emissziós folyamaté pedig arányos  $I_r [I_r + (2\pi h) v_r^3 / c^2]$ -tel; ezek éppen Einstein törvényei.\* Hasonlóan annak a folyamatnak a valószínűsége, melyben fénykvantum  $r$  állapotból  $s$  állapotba szóródik arányos  $I_r [I_r + (2\pi h) v_r^3 / c^2]$ -tel, ami az elektronon fellépő fényszóródás Pauli-féle törvénye.\*\*

\* „Z. f. Physik”, 19, 301, 1923.

\* Az indukált emisszióknak a spontánhoz való aránya a jelen elméletben éppen kétszerese az Einstein-féle eredménynek. Ennek oka, hogy a jelen elméletben a beeső sugárzás minden polarizált komponense csak ugyanúgy polarizált sugárzást tud indukálni, míg Einsteinében a két polarizált komponens együtt szerepel. Ez a megjegyzés a szórási folyamatokra is vonatkozik.

\*\* Pauli, „Z. f. Physik”, 18, 272, 1923.



### 7. §. Az emisszió és abszorpció valószínűségi együtthatói

Vizsgáljuk most meg atom és sugárzás kölcsönhatását hullámnézőpontból. A sugárzást Fourier-összetevőire bontjuk és feltesszük, hogy ezek száma igen nagy, de véges. Jelöljük  $r$  indexszel az összetevőket és tegyük fel, hogy adott polarizációra az  $r$ -edik komponens körüli egységnyi frekvenciatartományban, egységnyi térszögben a sugárzás komponenseinek száma  $\sigma_r$ . Az  $r$ -edik komponens egy  $\kappa_r$  vektorpotenciál írja le, melyet úgy választunk, hogy a skalár-potenciál zéró legyen. A perturbációs kifejezés, amelyet a klasszikus elméletnek megfelelően, a relativisztikus mechanika elhanyagolásával a Hamilton-operátorhoz kell adni, most  $c^{-1}\Sigma_r \kappa_r X_r$ , ahol  $X_r$  az atom teljes polarizációjának komponense  $k_r$  irányban, mely az  $r$ -edik komponens elektromos vektorának iránya.

Amint az 1. §-ban kifejtettük, feltehetjük, hogy a mezőt  $N_r, \theta_r$  kanonikus változók írják le, melyek közül  $N_r$  az  $r$  komponens energiakvantumjainak száma és  $\theta_r$  ennek kanonikusan konjugált fázisa, mely az 1. §  $\theta_r$ -jének  $2\pi h\nu_r$ -szerese. Ekkor  $\kappa_r = a_r \cos \theta_r / h$ , ahol  $a_r$  a  $\kappa_r$  amplitúdója, mely a következőképpen kapcsolódik  $N_r$ -hez: — Az energiaáramlás egységnyi felületen egységnyi idő alatt az  $r$ -edik komponensre vonatkozólag  $\frac{1}{2} \pi c^{-1} a_r^2 \nu_r^2$ . Innen a sugárzás intenzitása egységnyi frekvenciatartományonként az  $r$ -edik komponens környezetében  $I_r = \frac{1}{2} \pi c^{-1} a_r \nu_r^2 \sigma_r$ . Összehasonlítva ezt a (28) egyenlettel kapjuk, hogy  $a_r = 2(h\nu_r / c\sigma_r)^{1/2} N_r^{1/2}$  és innen

$$\kappa_r = 2(h\nu_r / c\sigma_r)^{1/2} \cos \theta_r / h.$$

A Hamilton-függvény az atom és a sugárzás együttes rendszerére a klasszikus elmélet szerint

$$F = H_p(J) + \Sigma_r (2\pi h\nu_r) N_r + 2c^{-1} \Sigma_r (h\nu_r / c\sigma_r)^{1/2} \dot{X}_r N_r^{1/2} \cos \theta_r / h \quad (29)$$

lenne, ahol  $H_p(J)$  az egyedülálló atom Hamilton-függvénye. A kvantumelméletben az  $N_r$  és a  $\theta_r$  változókat kanonikus  $q$  számokká kell tennünk a  $J_k, \omega_k$  változókhoz hasonlóan, amelyek az atomot írják le.  $N_r^{1/2} \cos \theta_r / h$ -t (29)-ben most a

$$\frac{1}{2} \{N_r^{1/2} e^{i\theta_r/h} + e^{-i\theta_r/h} \cdot N_r^{1/2}\} = \frac{1}{2} \{N_r^{1/2} e^{i\theta_r/h} + (N_r + 1)^{1/2} e^{-i\theta_r/h}\}$$

valós  $q$  számmal kell helyettesítenünk úgy, hogy a (29) Hamilton-operátor végül is:

$$F = H_p(J) + \Sigma_r (2\pi h\nu_r) N_r + h^{1/2} c^{-3/2} \Sigma_r (\nu_r / \sigma_r)^{1/2} \dot{X}_r \{N_r^{1/2} e^{i\theta_r/h} + (N_r + 1)^{1/2} e^{-i\theta_r/h}\}. \quad (30)$$

Ez (27) alakú az alábbi választással:

$$v_r = v_r^* = h^{-1/2} c^{-3/2} (\nu_r / \sigma_r)^{1/2} \dot{X}_r \quad (31)$$

és

$$v_{rs} = 0 \quad (r, s \neq 0).$$

Tehát a hullám-nézőpont a fénykvantum nézőponttal megegyezik és rögzíti a fénykvantum-elméletben ismeretlen kölcsönhatási tényező,  $v_{rs}$  értékét. Ezek az értékek nem olyanok, hogy lehetővé tegyék a kölcsönhatási energiának, mint a kanonikus változók algebrai függvényének kifejezését. Mivel a hullámelméletben  $v_{rs} = 0$ ,



ha  $r, s \neq 0$ , úgy tűnne, hogy nincs közvetlen szóródási folyamat, de ezt a jelen kvantumelmélet tökéletlenségének lehet tulajdonítani. Kimutatjuk, hogy a (30) Hamilton-operátor Einstein  $A$ -i és  $B$ -i számára korrekt kifejezésekhez vezet. Először kissé módosítanunk kell az 5. § elemzését arra az esetre, ha a rendszernek nagyszámú diszkrét stacionárius állapota van, ezek folytonos sorozata helyett. A (21) egyenlet helyett ekkor ez áll:

$$i\hbar a(\alpha') = \Sigma_{\alpha''} V(\alpha' \alpha'') \cdot a(\alpha'').$$

Ha a rendszer kezdetben  $\alpha^0$  állapotban van,  $a(\alpha')$  kezdeti értékét  $\delta_{\alpha' \alpha^0}$ -nak kell vennünk, amely most helyesen van normálva. Ezzel első közelítésben

$$i\hbar a(\alpha') = V(\alpha' \alpha^0) = v(\alpha' \alpha^0) e^{i[W(\alpha') - W(\alpha^0)]t/\hbar},$$

ami az

$$i\hbar a(\alpha') = \delta_{\alpha' \alpha^0} + v(\alpha' \alpha^0) \frac{e^{i[W(\alpha') - W(\alpha^0)]t/\hbar} - 1}{i[W(\alpha') - W(\alpha^0)]/\hbar}$$

kifejezésre vezet a (22)-nek megfelelően. Ha, mint előbb, a  $W, \gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{n-1}$  változókra térünk át, kapjuk (feltéve, hogy  $\gamma' \neq \gamma^0$ ):

$$a(W' \gamma') = v(W', \gamma'; W^0, \gamma^0) [1 - e^{i(W' - W^0)t/\hbar}] / (W' - W^0).$$

Annak valószínűsége, hogy a rendszer olyan állapotban van, amelyre minden  $\gamma_k$  értéke adott  $\gamma'_k$ :  $\Sigma_{W'} |a(W' \gamma')|^2$ . Ha a stacionárius állapotok egymáshoz közel fekszenek és ha a  $t$  idő nem túl nagy, akkor ez az összeg a következő integrállal helyettesíthető:

$$(\Delta W)^{-1} \int |a(W' \gamma')|^2 dW',$$

ahol  $\Delta W$  az energiaszintek egymástól való távolsága. Az előbbi módon kiértékelve az integrált az olyan állapotba való átmenetnek a valószínűsége, melyre minden  $\gamma_k = \gamma'_k$ :

$$2\pi/\hbar \Delta W \cdot |v(W^0, \gamma'; W^0, \gamma^0)|^2. \quad (32)$$

Ezen eredmény alkalmazása során a  $\gamma$ -kat bármely olyan változók sorozatának vehetjük, melyek a  $W$  teljes sajátenergiától függetlenek és  $W$ -vel egy stacionárius állapotot határoznak meg.

Most visszatérünk a (30) Hamilton-operátor által megadott problémához és tekintsünk egy abszorpciós folyamatot, melyben az atom  $J^0$  állapotból  $J'$  állapotba ugrik egy  $r$  állapotú fénykvantum elnyelésével. A  $\gamma'$  változóknak vegyük az atom  $J'$  változóit azokkal a változókkal együtt, melyek meghatározzák az elnyelt kvantum mozgásirányát és polarizációs állapotát, de az energiáját nem. Ekkor a  $v(W^0, \gamma'; W^0, \gamma^0)$  mátrixelem:

$$\hbar^{1/2} c^{-3/2} (v_r/\sigma_r)^{1/2} \dot{X}_r(J^0 J') N_r^0,$$

ahol  $\dot{X}_r(J^0 J')$   $X_r$ -nek a szokásos  $(J^0 J')$  mátrixeleme. Innen (32)-ből az elnyelési folyamat időegységre eső valószínűsége:

$$\frac{2\pi}{\hbar \Delta W} \cdot \frac{\hbar v_r}{c^3 \sigma_r} |\dot{X}_r(J^0 J')|^2 N_r^0.$$

Avégből, hogy megkapjuk annak a folyamatnak a valószínűségét, midőn a fénykvantum valamely irányból  $d\omega$  térszögben érkezik, meg kell szoroznunk ezt a kifejezést a fénykvantumok számára a  $d\omega$  térszögben lehetséges irányok számával, ami  $d\omega \sigma_r \Delta W / 2\pi h$ . Így (28) felhasználásával:

$$d\omega \frac{v_r}{hc^3} |\dot{X}_r(J_0 J')|^2 N_r^0 = d\omega \frac{1}{2\pi h^2 c v_r^2} |\dot{X}_r(J^0 J')|^2 I_r.$$

Innen a valószínűségi együttható az elnyelési folyamatra  $1/2\pi h^2 c v_r^2 |\dot{X}_r(J^0 J')|^2$ , megegyezésben Einstein abszorpciós együtthatójának a mátrixmechanikában szokásos értékével. Az emissziós együtthatókra az egyezés ugyanúgy igazolható.

A jelen elméletnek, mivel a spontán emisszióra helyes eredményt szolgáltat, feltehetően meg kell adnia a sugárzás visszahatását a kibocsátó rendszerre és lehetővé kell tennie a természetes spektrumvonal-szélesség kiszámítását, ha a (30) Hamilton-operátorhoz tartozó hullámprobléma általános megoldásában rejlő matematikai nehézségekkel meg tudunk küzdeni. Az elmélet lehetővé teszi annak megértését is, hogy pl. az atom fotoelektront bocsát ki igen gyenge sugárzás hatására az energiamegmaradás törvényének megsértése nélkül. Az atom és a sugárzás kölcsönhatásának energiája  $q$  szám, mely nem cserélhető fel az egyedül vett atom mozgásának első integráljaival vagy a sugárzás intenzitásával. Így ezt az energiát nem lehet  $c$  számmal kifejezni ugyanakkor, amikor az atom stacionárius állapotát és a sugárzás intenzitását  $c$  számokkal fejezzük ki. Speciálisan nem mondhatjuk, hogy a kölcsönhatási energia zérushoz tart, amint a beeső sugárzás tart a zérushoz. Mindig létezik tehát a kölcsönhatási energiának egy meghatározhatatlan mennyisége, mely a fotoelektron kiépítéséhez szükséges energiát szolgáltatja.

Szeretném kifejezni köszönetemet *Niels Bohr* professzornak e munka iránt tanúsított érdeklődéséért és a problémákról folytatott baráti beszélgetésért.

### Összefoglalás

Az Einstein—Bose statisztikus mechanikának eleget tevő hasonló rendszerek olyan sokaságának problémáját tárgyaltuk, amely más, tőle különböző rendszerrel van kölcsönhatásban, és megadtunk egy Hamilton-függvényt a mozgás leírására. Az elméletet alkalmaztuk fénykvantum-sokaságnak közönséges atommal való kölcsönhatására és kimutattuk, hogy ez megadja Einsteinnek a sugárzás emissziójára és abszorpciójára vonatkozó törvényeit.

Ezután egy atomnak elektromágneses hullámokkal való kölcsönhatását tekintettük és kimutattuk, hogy ha a hullámok energiáit és fázisait helyes kvantumfeltételeket kielégítő  $q$  számoknak tekintettük  $c$  számok helyett, akkor a Hamilton-függvény ugyanolyan alakot vesz fel, mint a fénykvantumok tárgyalásánál. Az elmélet Einstein  $A$ -i és  $B$ -i helyes kifejezéseire vezet.

Fordította: Bakács Istvánné és Csoma Zsigmond





## KÖZLEMÉNY

---

### AZ MTA ATOMMAGKUTATÓ INTÉZETE JUBILEUMI NEMZETKÖZI PÁLYÁZATÁNAK EREDMÉNYE\*

1979-ben volt az MTA Atommagkutató Intézete alapításának 25. évfordulója. Ebből az alkalomból az intézet nemzetközi pályázatot hirdetett a szocialista országok olyan kutatóhelyeinek fiatal kutatói számára, amelyek az ATOMKI-vel az elmúlt huszonöt évben együttműködést folytattak, vagy jelenleg is együttműködnek.

A pályázat témája az alacsony energiájú magfizika, illetve a magfizikának más tudományokban és a gyakorlatban való alkalmazása volt. A pályázók megjelent közlemények különlenyomataival, közlésre elfogadott cikkek kéziratával, vagy a pályázatra készített dolgozatokkal vehettek részt a pályázaton.

A pályázaton három ország kilenc kutatója vett részt, összességében tekintve magas színvonalú művekkel, amelyek többsége a magfizikai alap kutatás témakörében elért eredményeket ismertetett.

A pályamunkák elbírálását a Magyar Tudományos Akadémia tagjaiból álló, az intézet által felkért bíráló bizottság végezte Szalay Sándor elnöklétével.

Az alábbiakban az első három helyezett munkáját ismertetjük vázlatosan.

A bíráló bizottság a pályázat első helyét *A. I. Shlyakhternek*, a Szovjetunió Tudományos Akadémiája A. I. Konsztantyinovról elnevezett Leningrádi Magfizikai Intézete munkatársának ítélte.

*A. I. Shlyakhter* munkájának alapgondolata az, hogy a több mint egy milliárd éves nyugat-afrikai (OKLO-Gabon) természetes úton bedúsult uránból létrejött magreaktor jelenlegi állapotából következtetéseket lehet levonni az alapvető kölcsönhatási konstansokban esetleg bekövetkező megváltozás mérésére. Az elvégzett vizsgálatok eredménye az, hogy az erős, a Coulomb és a gyenge csatolási konstans megváltozása kisebb mint ami a Dirac-féle hipotézisből következne. Az eredmény alapvető jelentőségű, mivel eddig más úton kapott eredmények nagyságrendekkel nagyobb alsó határt tudtak adni erre a változásra.

A pályázat második helyezettje *H. Reinhardt*, a Rossendorfi Központi Magfizikai Kutatóintézet, jelenleg a dubnai Egyesített Atomkutató Intézetben dolgozó munkatársa. *H. Reinhardt* a Nuclear Physics-ben megjelent cikksorozattal pályázott, amelyben a magfizikai jelenségeknek az eredetileg *B. Mottelson* által javasolt új megközelítési módjával, az ún. „magfizikai térelmélettel” foglalkozik. Munkájának jelentősége abban áll, hogy a pályaintegrálok módszerének segítségével, szigorú tárgyalásban sikerült tisztázni az új elmélet elvi alapjait.

\* Érkezett 1979. jún. 30.



A harmadik helyezést *W. A. Kaminski*, a lublini M. Sklodowska-Curie Egyetem munkatársa nyerte. *W. A. Kaminski* pályázatában a magfizikai mátrixelemek kiszámítására *S. Szpikowski* és *K. T. Hecht* társszerzőkkel kifejlesztett új eljárással foglalkozik, amelynek hatékonyságát az  $f_{7/2}$  héjhoz tartozó magok Coulomb-energiáinak kiszámításával demonstrálja. Az új módszer nagyban elősegítette ezen héjhoz tartozó magok vizsgálatát.

Összefoglalásul a pályázatot úgy értékelhetjük, hogy a pályázat hozzájárult az atommagokra vonatkozó ismereteink bővüléséhez, valamint lehetővé tette a részt vevő kutatóintézetek munkájának jobb megismerését.

*Zolnai László*

## KÖNYVISMERTETÉS

M. Cardona and L. Ley (ed.): Photoemission in Solids II.  
Topics of Applied Physics 27. kötet  
Springer-Verlag 1978

A kötet a 26. kötettel képez egységet. Az előző kötet ugyanis részletesen ismerteti a fotoemisszió elméleti alapjait, míg a 27. kötet 7 fejezete az alkalmazási területekkel foglalkozik. Az első fejezet L. Ley, M. Cardona és R. A. Pollack munkája a félvezetők fotoemissziós vizsgálatával foglalkozik. Mivel az objektumok elektronszerkezete sok esetben már jól ismert, ez a fejezet a módszer alkalmazhatóságát mutatja be beleértve a felületi effektusok hatását a fotoelektron spektrumra. A fejezet tartalmazza a félvezetők sávszerekezetének részletes ismertetését, kitérve az amorf félvezetőkre is. A következő fejezet, S. Hüfner munkája az átmeneti fémek és vegyületek vizsgálatát tárgyalja. Ismerteti a sávyszerkezetre vonatkozó eredményeket, részletesen foglalkozik a „d” pályák és más energianívók hibridizációjával. A törzsi nivókkal és a multiplitt splitting-el azonban nem ez a fejezet foglalkozik. A következő fejezet M. Campagna, G. K. Wertheim, és Y. Baer szerzőktől a ritka földfémek és vegyületeik fotoemissziós vizsgálatait ismerteti, különös tekintettel a  $4f$  multiplettek helyzetére. Az ötödik fejezetben — W. D. Grobman és E. E. Koch munkája — szerves molekulakristályok fotoemissziós vizsgálatára vonatkozóan találunk eredményeket, részben a szerzők saját, még nem publikált kísérleti munkájából. A fejezet elsősorban a szilárd test effektusokat tárgyalja és részletesen a töltésátviteli rökkel foglalkozik, így a sokat vizsgált TTF—TCNQ, valamint az  $(SN)_x$  rendszerrel. A szerzők rámutatnak azokra a vonásokra, melyek a tárgyalt metodika szerves anyagokra történő alkalmazását jellemzik. A következő fejezet C. Kunz munkája a fotoemissziós spektroszkópia legmodernebb ágával, a szinkrotron sugárforrás felhasználásával történő vizsgálatokkal foglalkozik. Miután részletesen ismerteti a sugárzás tulajdonságait, a technikai megoldások részletezésére kerül sor. Az utolsó fejezet — P. Steiner, H. Höchst és S. Hüfner szerzőktől — a fotoemissziós spektroszkópiának az egyszerű fémek (alkáli fémek, Al, Be, Mg) vizsgálatára való alkalmazásával foglalkozik. Sok új, és több esetben máshol még nem publikált eredményt ismertetve tárgyalja a soktest-effektusokat. Ebben a fejezetben XPS eredmények is helyet kaptak elméleti értelmezésükkel együtt. Összefoglalva; e kötet az előző elméleti eredményeket tárgyaló kötettel együtt a fotoemissziós (UPS) vizsgálatok szinte teljes területét feldolgozta. Irodalomjegyzékei igen értékesek, még 1979-es hivatkozásokat is találunk. Mind e szakterület művelői, mind az érdeklődők számára hasznos.

Fidy Judit

S. Barisic, A. Bjelis, J. C. Cooper, B. Leontic (ed.)  
Quasi-one-Dimensional Conductors I-II  
Lecture Notes in Physics Vol. 95—96.  
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg New York, 1979

A könyv, amely az 1978 szeptemberében Dubrovnikban tartott azonos című konferencia előadásait tartalmazza, a sorozat 34. (One-Dimensional Conductors GPS Summer School Proceedings Saarbrücken, 1974) és 65. (Organic Conductors and Semiconductors Proceedings, Siófok, 1976) kötete folytatásának tekinthető, összefoglalja a terület fejlődését az utóbbi két évben. Az aktivitás élenkülését a terjedelemben fokozatos növekedése is jelzi, a mostani anyag már két kötetet tesz ki.

Az egydimenziós vezető anyagok (szerves sók, fémorganikus vegyületek, kalkogenidek, polimerek) kutatásában a motiváló tényező kezdetben a magas hőmérsékleten szupravezető anyagok előállításának reménye volt. Erre az időszakra rengeteg új anyag előállítása és „kipróbálása” volt jellemző, azaz elsősorban szintetikus kémia és elektromos, illetve mágneses tulajdonságok vizsgálata kapta a fő hangsúlyt, az elméleti munkák pedig csak igen kis részben kötődtek konkrét



anyagokhoz. A mostani helyzetre a következő fő vonások a jellemzőek: az új anyagok számának lényeges csökkenése, a meglevők sokkal szélesebb körű vizsgálata és az elméleti és kísérleti munkák közeledése. Ez utóbbit jelzi az anyag tagolása is, elméleti és kísérleti fejezetek helyett elsősorban a vizsgált jelenségek, illetve anyagcsaládok szerinti felosztást találunk. A kilenc fejezet: 1. Szerkezeti tulajdonságok, 2. Elektronikus tulajdonságok, 3. Dielektromos tulajdonságok, 4. A vezetés fonon-mechanizmusa, nemlineáris vezetés, 5. Elektron-instabilitások, 6. Inkommenzurábilis rácsok és fémorganikus vegyületek, 7. Rendezetlenség, 8. Új anyagok, 9. Polimerek.

Az eddigi két konferenciához képest a legtöbb újdonságot a 3., 4. és 9. fejezet tartalmazza. A 3. fejezet az anomális dielektromos tulajdonságokkal foglalkozik (infravörös és mikrohullámú frekvenciákon), a 4. az egyes szerves vezetőkben és trikalkogenidekben is fellépő nem lineáris vezetésről szóló előadásokat tartalmazza. A nyolcadik, „Új anyagok” fejezetben új anyagcsaláddal nem találkozunk, a jellemző a meglevők bizonyos mértékű kontrollált módosítására, „ötvöztetésére” való törekvés, a területen jelenleg kibontakozó elemző munkával összhangban. Igen figyelemreméltó a kilencedik fejezet, amely egy olyan új anyagcsaládot — a vezető polimereket — tárgyalja, amely a gyakorlati felhasználás szempontjából a legtöbb reménnyel kecsegtet, néhány munkában már az ehhez vezető első lépéseket ismertetik.

A két kötet olyan szerzőket vonultat fel, mint J. Hubbard, A. Abrikosov, L. Gorkov, W. A. Little, E. Conwell; tartalmazza John Bardeen zárszavát is. A szilárdtest-fizikusok mellett szintetikus vegyészek és fiziko-kémikusok érdeklődésére is számot tarthat.

*Kamarás Katalin*

**T. S. Huang (ed.): Picture processing and digital filtering**  
**Second corrected and updated edition**  
**Topics in Applied Physics. Vol. 6.**  
**Springer-Verlag, Berlin, 1979**

A könyv témája a kétdimenziós jelfeldolgozás, azon belül tárgyalja a digitális és az analóg technikákat is; az előbbieket lényegesen nagyobb terjedelemben. Az első, bevezető fejezetben a könyv szerkesztője, T. S. Huang vázolja a könyv által lefedett területet, és bemutatja az egyes fejezetek összefüggéseit egymással. A következő 3 fejezet a kétdimenziós transzformációs- és szűrő-eljárásokkal foglalkozik: H. C. Andrews cikke egységes matematikai kezelésben adja a különböző ismert transzformációkat, J. G. Fiasconaro munkája a nem rekurzív-, míg R. R. Read, J. L. Shanks és S. Treitel cikke a rekurzív szűrési technikákat foglalja össze. Az 5. fejezetet B. R. Frieden írta a képkiemelés (image enhancement) és -visszaállítás (restoration) körében elért eredményekről. A 6. fejezet, szerzője F. C. Billingsley, a zajok által okozott hardware problémákról szól, különös tekintettel a szkennerekre. A 7. fejezet, amely teljesen új a második kiadásban, a könyv témájával kapcsolatos legfrissebb eredményeket tekinti át, több mint száz irodalmi hivatkozással. Ez a fejezet is a könyv szerkesztőjének, T. S. Huangnak a munkája.

A könyv összefoglaló, de nem bevezető jellegű, bizonyos jártasságot feltételezve az olvasóról a témában. Különösen az 5. fejezet, de a többi is kézikönyvszerűen mutat be a kétdimenziós jelfeldolgozás (beleértve képfeldolgozást is) területén született számos eljárást, és vázolja a jelenlegi kutatási irányokat is.

*Mérő László*

**S. Albeverio, Ph. Combe, R. Høegh-Krohn, G. Rideau M. Sirugue-Collin, M. Sirugue és R. Stora**  
**(ed.): Feynman Path Integrals**

**A „Lecture Notes in Physics” sorozat 106. kötet**  
**Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York 1979**

A Feynman-pálya integrálokra vezető gondolatok Diracnak a harmincas és Feynmannak a negyvenes években megjelent munkáiban találhatók meg. Különösen Feynmann hozzájárulása jelentős, aki az átmeneti amplitúdókat a „pálya téren” vett heurisztikus integrálok alakjában fejezte ki és ezzel egy másféle általános megfogalmazását adta a kvantumdinamikának, amely megfogalmazás bizonyos esetekben egyenértékű a megelőző megfogalmazásokkal (Heisenberg, Schrödinger) és újabb változatokkal (Schwinger). Matematikailag, a Feynman által bevezetett heurisztikus integrálok, függvények tere fölött vett integrálok, ezen tárgykör klasszikus gyökerei Volterrának a variációs számításról írt munkáiban találhatók meg és az első nagy lépés ezen a területen pedig az volt, amikor Wiener bevezette a Wiener-integrálokat a Brown-mozgás és a hőterjedés leírására.



Amíg a Wiener-integrálok és általánosabban a később a sztohasztikus folyamatok elméletének tanulmányozásában bevezetett integrálok, pozitív véges mértékre vett integrálok, addig a Feynman-pálya integrálokra vonatkozó heurisztikus kifejezés komplex formális sűrűség segítségével van felírva, amely nem definiál mértéket. Így a Feynman-pálya integrálnak a matematikai definíciója fontos új problémát jelent.

Erről az érdekes témáról szerveztek Nemzetközi Kollokviumot Marseillen 1978 májusában. A kötet a legfontosabb előadások teljes anyagát tartalmazza. A kötet a következő fejezetekre tagolódik.

Az első fejezet a Feynman-pálya integrálok matematikai definíciójával és azon matematikai eszközök kifejlesztésével foglalkozik, amelyek arra szükségesek, hogy korrektül használhassuk a Feynman-integrálokat. S. Albeverio és R. Höegh-Krohn a Feynman-pálya integrálokat mint végtelen dimenziós tereken vett oszcilláló integrálok speciális esetét definiálják. A módszerüket kvantummechanikára és kvantumelméletre alkalmazzák. A. M. Chebotarev és V. P. Maslov, valamint A. Truman a Feynman-pálya integrálok törtvonal pályákkal való megfogalmazását adják, ezek a cikkek a Feynman által kijelölt utat próbálják pontosá tenni.

A második fejezet a „nem kommutatív” Feynman-integrálokra vonatkozó elképzeléseket gyűjti össze, amelyek a fermionok kvantumtérelméleti leírásához szükségesek. Ph. Combe, R. Rodrigez, M. Sirugue-Collin és M. Sirugue új megközelítést javasolják a spin és fermionrendszerek kvantálásának, elkerülve a szokásos Grassmann-algebrákra alapozott eljárást. Megmutatják, hogy a bozonok és fermionok ugyanazon matematikai keretbe illeszthetők be, a két rendszer kvantumkommutációs és antikommutációs relációit az abeli csoportok centrális kiterjesztéseiből származtatják le. P. Kree előadása a Feynman-pályaintegrálokról és a formák elméletéről szól,  $\varepsilon$ -szimmetrikus formái segítségével univerzálisan képes az elméletet bozonokra és fermionokra kidolgozni.

A harmadik fejezet az euklideszi térben definiált kvantumtérelmélettel foglalkozik, amely alkalmasan definiálva kapcsolatba hozható a Minkowsky-térbeli elmélettel. Ph. Blanchard a lokális jellemzők Dobrushin–Föllner-módszerét alkalmazva tud feltételes, valószínűségek rendszeréhez kapcsolódó sztohasztikus folyamatokat felépíteni. P. Collet a hierarchikus modell hőmérséklet-függést renormalizációs csoport segítségével írja le. Bizonyítja nemtriviális fixpont létezését és kiszámítja a kritikus indexeit. D. Dohrn, F. Guerra, P. Ruggiero Nelson sztohasztikus mechanikai megközelítést terjesztik ki töltött, spines, elektromágneses térrel kölcsönható részecskék esetére. R. Gielerak, W. Karwowski és L. Streit általánosított random teret konstruálnak egy adott euklideszi invariáns térből. Például Gauss-típusú térből nemgauss típusú „ultralokális” teret kapnak. I. Rauch és D. N. Williams nemlineáris skalár térelméleteket vizsgálnak, és megmutatják mikor létezik a téregyenletek megoldása és milyen függvényosztályba tartozik. L. Streit rövid cikket közöl a null-sík kvantumterekről és a null-síkon definiált általánosított random terekről.

A negyedik fejezet a különböző kvantálási eljárások „geometriai kvantálás”, „Poisson-zárójelek”, valamint csoport reprezentációk elméletének a Feynman-pályaintegrál módszerrel való kapcsolatát vizsgálja. A Lichnerowicz előadása a Poisson-zárójelek Lie-algebrájának deformáció-elméletével foglalkozik és megmutatja, hogy a deformációk új megvilágítást adják a kvantummechanikának. D. J. Simms cikkében levezeti a Feynman-pályaintegrál leírást egy általános végesdimenziós időfüggő nemrelativisztikus Hamilton-függvénnyel leírt rendszerre felhasználva Kostant és Souriau geometriai kvantálási módszerét. Souriau röviden ismerteti a hármas „szorzattal” definiált algebrákat.

Az ötödik fejezetben a Feynman-pályaintegrál módszer általánosításának lehetőségét vizsgáló dolgozatok találhatók. C. DeWitt–Morette a Feynman-integrál módszer görbült téridőre való kiterjesztését adja meg. M. M. Mizrahi klasszikus Hamilton-függvényből tetszőleges korrespondencia elv segítségével definiált Hamilton-operátorok propagátorának pályaintegrál előállítását adja meg. I. Tarski Feynman-típusú integrált definiál absztrakt Hilbert-téren véges dimenziós vetületekkel meghatározott közelítések segítségével.

A hatodik fejezet a mértékterek elméletével foglalkozik. H. Hogreve, R. Schrader és R. Seiler korlátokat vezet le a tetszőleges külső elektromágneses térben mozgó skalár és spinor részecske funkcionáldeterminánsára. A. A. Slavnov a tömeges vektormezonok mértékvariáns leírását adja meg chirális skalár terek segítségével. Cikkében nemperturbatív definíciót javasol,  $1/N$  sorfejtést, amely az  $S$ -mátrix következetes számítását teszi lehetővé. J. Madore, J. L. Richard és R. Stora az önduális mértékterek részletes algebrai topológiai leírását adja.

A hetedik fejezet a perturbációszámítás magas rendjeire vonatkozó aszimptotikus becslésekkel foglalkozik. R. Balian, G. Parisi és A. Voros a negyedfokú anharmonikus oszcillátor segítségével mutatják meg hogyan szolgált a komplex WKB közelítés információt a szemiklasszikus sorok Borel-transzformáltjainak szingularitásairól. C. Itzykson összefoglaló előadást ad a perturbáció-



számítás magas rendjeinek számolásáról. L. O'Raiheartaigh és G. Parravicini a kvantumtérelméleti effektív potenciál számolásában keletkező anomáliákat vizsgálja.

Az utolsó fejezet a konferencián elhangzott további rövidebb előadások kivonatát tartalmazza.

A Feynman-pályaintegrál matematikai problémáival foglalkozó konferenciát rendezni nagyon szerencsés gondolat volt. A kötet egyetlen hátránya talán kétnyelvűsége, bizonyos előadások anyagát franciául közli. A téma után érdeklődő fizikus és matematikus olvasó számára hasznos és gazdag anyagot ad ez a könyv, széles áttekintést nyújt az összes ezen a területen dolgozó kutatók munkájáról.

*Horváth Zsolt*

**Ph. A. Martin: Modeles en Mécanique Statistique de: Processus Irréversibles**

**Lecture Notes in Physics. Vol. 103**

**Springer. Berlin, Heidelberg, New York, 1979. 134. oldal**

Az irreverzibilis folyamatok termodinamikáját nem tudjuk mikroszkopikus törvényekből olyan világos alapfeltevések alapján levezetni mint az egyensúlyi termodinamikát. Egyensúlyban — ha a Gibbs-leírást egyszer már elfogadtuk — az elmélet igen általánosan és teljes matematikai szigorral dolgozható ki. Egyensúlyon kívül azonban nem ismerjük sem az állapotok szerkezetét, sem fejlődésüket. Ennek az is oka, hogy az egyensúlyon kívül a fizikai rendszerek óriási változatosságot mutatnak, amely nem egykönnyen vezethető le kevés számú alapelvből, ahogyan ezt egy általános elmélettel joggal elvárhatnók.

Bizonyos speciális modellek kutatásában viszont jelentős fejlődés következett be az elmúlt években mind a matematikai megfogalmazás pontosságában, mind az irreverzibilis folyamatok mögött rejtő mikroszkopikus folyamatok megértésében. A szerző célja három konkrét, lényegesen eltérő modell tárgyalásán keresztül képet adni erről a fejlődésről. A három téma a napjainkban sokat kutatott *Lorentz-gáz*, amely zárt klasszikus rendszert ír le; nyitott, termostáttal kölcsönható rendszerek fejlődését leíró *Master-egyenletek* (Pauli-egyenlet, Fokker—Planck-egyenlet), végül a *lézer*, amely nyílt kvantummechanikai rendszer és amelyben az egyensúlyon kívül figyelhető meg fázisátmenet.

A három témát tárgyaló fejezetek egymástól függetlenül olvashatók, a felhasznált matematikai apparátus — a szerző szándékának megfelelően — viszonylag egyszerű.

*Szász Domokos*

**A. Martin-Löf: Statistical Mechanics and the Foundations of Thermodynamics**

**Lecture Notes in Physics. Vol. 101**

**Springer. Berlin-Heidelberg-New York, 1970. 120 oldal**

Ha ma szánná rá magát valaki, hogy egy könyvben a statisztikus fizika szigorú matematikai tárgyalását adja, akkor munkája eredménye olvashatatlanul hosszú és nehézkes mű lenne. A recensens véleménye szerint 10—20 év múlva ugyanez a cél megvalósítható lesz egy mai, fizikai tárgyalás terjedelmén belül. Ezenfelül kristálytisztán látható lesz a statisztikus fizika fogalmainak, feltevéseinek és következtetéseinek logikai szerkezete.

Anders Martin-Löf a rövid munkája azért rendkívül jelentős, mert — a termodinamika alapjainak témájára korlátozva — sikeres kísérletet tesz egy matematikailag szigorú felépítésre. A kísérlet sikerét természetesen elősegíti, hogy a szerző aránylag szűk területre korlátozza vizsgálatait, ahol a matematikai tárgyalásnak már komoly hagyományai (Gibbs, Boltzmann, Hincsin, Kac, Ford-Uhlenbeck) vannak. A sikert igazolja a mű rövid terjedelme is. Sőt, első ismerkedésre érdemes a bizonyításokat átugrani, elég tudni, hogy azok léteznek, s ily módon igazán gyors és világos úton juthatunk el az egyensúlyi termodinamika alapjainak megértéséhez. A könyv három fejezetből áll: 1. Klasszikus mechanikai rendszerek statisztikai leírása, 2. Az egyensúlyi eloszlások vizsgálata, 3. A nagy számok törvénye makroszkopikus változókra és a termodinamika alapjai.

*Szász Domokos*



**W. Walcher: Praktikum der Physik**  
**Teubner Studienbücher. 1979. Stuttgart**  
**4. átdolgozott kiadás**

12 évvel ezelőtt jelent meg a munka első kiadása. Hogy azóta át-átdolgozták, az természetes. Mégis fizikai fejlődési érdekességek is kiolvashatók egy ilyen, egyetemi hallgatók számára írt praktikumból.

Hogy a végén található táblázatokkal kezdjem, a bázisanyagok és bázisegységek táblázatába belépett a mól, de úgy mint az az anyagmennyiség, amely ugyanannyi részecskét tartalmaz, mint a tisztán 12 C atomokból álló 12 g szén. — A mennyiségek és egységeik közül már hivatalosan elavultak (erre utaló lábjegyzettel) az SI-rendszerben való megfelelőjükkel szerepelnek. — Az első kiadásban a periodikus rendszer a hagyományos, itt a legmodernebb táblázattal szerepel. — Új táblázatok is vannak, de egyeseket mint pl. a fémgőz lámpák spektrumai kimaradtak.

A könyv régi szövegéből kimaradt részek (pl. a Lummer—Brodhun-fotométer) nem tudtak elég helyet adni a fejlődés kívánta új vagy részben új fejezeteknek. Így az eredeti terjedelem 80 oldallal bővült. Ebből majd 30 oldalt a „Digitale Elektronik. Schaltalgebra” (W. Zimmerman munkája) tesz ki. Ez a fejezet nemcsak a mai elektronika alapjainak laboratóriumi begyakorlását, hanem biofizikai vonatkozásai miatt biomembránok és egyes érzékszervek működésének — a mai elméletek szerinti működésének — megértését is elősegítik.

Mindezekkel együtt Wachter munkája ma talán a legteljesebb egyetemi fizikai praktikum, amelyből nemcsak sokat tanulhatnak az egyetemi hallgatók, hanem hasznosan forgathatják oktatóik is. (T. Gy.)

**D. Smidt: Reaktor-Sicherheitstechnik**  
**Springer-Verlag, 1979. 291 oldal**

Az utóbbi évtizedben az atomenergia a világ számos országában (így nálunk is) a hagyományos energiahordozókból nyerhető energia versenytársává vált: általában gazdaságosabb és a környezetre gyakorolt hatások tekintetében lényegesen előnyösebb. Részben tudati, részben a valóságban gyökerező okai vannak annak, hogy az atomerőművek biztonságának kezdettől fogva olyan szokatlanul nagy figyelmet szentelnek mind a szakemberek, mind a nagyközönség körében. Az atomerőmű valóban jelentős veszélyforrás. A különböző veszélyek elhárítására szolgáló berendezések, rendszerek, intézkedések hatásságának a megítélése szinte önálló tudománnyá fejlődött, amelynek könyvtárnyi irodalma van.

Dr. Dieter Smidt könyve azt tűzte ki célul, hogy a reaktorbiztonság kérdéseiről egy olyan áttekintést adjon, amelyben mindig az atomerőmű egészét tartja szem előtt. Véleménye szerint, ha nem vesszük figyelembe az egyes részek kölcsönhatását, és csak speciális kérdésekkel foglalkozunk, akkor „csúnya meglepetések érhetnek bennünket, és gyakran több kárt csinálunk, mint hasznot”. Ennek a megállapításnak az igazát jól illusztrálja a Harrisburgi Atomerőműben (USA, Pennsylvania) bekövetkezett üzemzavar lefolyása.

A könyv elsősorban az amerikai és nyugatnémet gyártmányú könnyűvízes reaktorokkal (köztük is elsősorban a nyomottvízesekkel), valamint (kisebb mértékben) a nátriumhűtésű gyorsreaktorokkal foglalkozik. A biztonságtechnikai alapfogalmaknak és az atomerőműnek, mint rendszernek az ismertetése után következik a nyomottvízes atomerőművek biztonsági rendszereinek az ismertetése. A forralóvízes és nátriumhűtésű gyorsreaktorok biztonsági rendszereinek csak azokat a vonásait tárgyalja a szerző, amelyek ezeket a nyomottvízes reaktoroktól megkülönböztetik.

A leíró rész után kerül sor a különböző tranziensek (üzemzavarok) és balesetek lefolyásának az elemzésére az említett három típusra vonatkozóan. A vizsgált üzemzavarok köre felöleli a reaktívitasbevitelből, a térbeli teljesítményeloszlás eltorzulásából, a hőelvezetés lecsökkenéséből és hűtőközeg túlmegedéséből eredő tranzienseket. A könyv részletesen kitér a hűtőközeg elvesztéséből (csőtörésből), valamint külső behatásokból (árvíz, földrengés, kémiai robbanás, repülőgépbecsapódást stb.) eredő következményekre. A tárgyalás szétválasztja egymástól azokat az eseteket, amelyekben a reaktor vészleállító és vészűtő rendszerei működnek, és azokat az eseteket, amelyekben ez utóbbiak egyike vagy mindegyike felmondja a szolgálatot. Ez utóbbi esetben már számolni kell az aktív zóna megolvadásával, ezért ennek a következményeit és esélyeit a szerző egy külön fejezetben tárgyalja. A könyv külön érdekessége, hogy az első ilyen témájú könyv, amely az 1979. március 28-án Harrisburgban lejtátszóó események értékelésére vállalkozik.

A könyvet haszonnal forgathatja minden szakember, aki a legszükségesebb reaktortechnikai ismeretekkel rendelkezik. Tekintve, hogy az épülő Paksi Atomerőmű nyomottvízes típusú, a magyar



szakemberek széles köre talál a könyvben hasznos tudnivalókat. A szerző anyagát nem mint egy lezárt területet, mint egy tananyagot ismerteti, hanem kitér a vitás kérdésekre is. Ebben a tekintetben különösen gondolatébresztők azok a részek, ahol az amerikai és a nyugatnémet felfogás közötti eltérésekről van szó. (Sz. Z.)

**S. Villani (editor): Uranium Enrichment.  
Topics in Applied Physics, 35  
Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1979**

A közeljövő realiztikusan belátható néhány évtizedében a fosszilis eredetű energiahordozók sorozat 35. kötete a 235-ös izotópban enyhén dúsított  $UF_6$  gáz előállításának problematikájával egyedüli versenytársaként a nukleáris fűtőanyagok jönnek számításba. A Topics in Applied Physics foglalkozik; ebből a kiindulási termékből nyerhető a jelenleg működő atomreaktorok nagy többségének az üzemanyaga.

A hét részből álló monográfia első fejezete (S. Villani, Joint Research Centre, Commission of the European Communities) az egyes dúsítási eljárásokat gazdaságosságuk, jelenlegi és perspektivikus elterjedésük szempontjából vizsgálja. A második fejezetben (B. Brigoli, CISE, Milano) a kaszkádelmélettel ismerkedhet meg az olvasó; ez a fejezet szorosan kapcsolódik a (D. Massignon — Centre d'Etudes Nucleaires de Saclay — által írt) harmadik fejezethez, amely a napjainkban legelterjedtebben alkalmazott gázdifúziós eljárást tárgyalja. Ez a fejezet — jelenség szinten — részletesen foglalkozik a difúziós barrierben, illetve az egy fokozaton belül lejátszódó folyamatokkal, összefoglalja az  $UF_6$  gáz tulajdonságait és ismerteti a technológiával, a tervezéssel, valamint az üzemeltetéssel kapcsolatos problémákat, végül röviden áttekinti a gázdifúziós elven működő dúsítókat és a fejlesztésük várható trendjét.

A negyedik (Soubbaramayer, Centre d'Etudes Nucleaires de Saclay) és az ötödik (E. W. Becker, Kernforschungszentrum Karlsruhe) fejezet a gázdifúziós eljárással versengő centrifugás és aerodinamikai technikákat elemzi; jelenleg mindkettő a kísérleti üzemi megvalósítás stádiumában van.

A két utolsó fejezet olyan eljárásokat diszkutál, amelyeket jelenleg csak laboratóriumi körülmények között vizsgálnak: a hatodik fejezetben (C. P. Robinson és R. J. Jensen, University of California, Los Alamos) a különböző urán izotópot tartalmazó  $UF_6$  molekulák elérő optikai gerjesztésén alapuló lézeres elválasztást találjuk, míg az utolsó fejezet (F. Boeschoten, Kernforschungsanlage Jülich és N. Nathrath Messerschmidt—Bölkow—Blohm, München) az ionozált molekulák elválasztásának lehetőségeivel (plazma-szeparációval) foglalkozik.

A monográfia logikusan egymáshoz kapcsolódó részei felölelik az uránium dúsításának meglevő, valamint perspektivikus módszereit. A fejezetek terjedelme arányban áll az általuk diszkutált téma jelenlegi súlyával, valamennyi fejezetet terjedelmes irodalomjegyzék egészít ki. A könyv olvashatóságát nagyban elősegíti a gondos tördelés, továbbá a szöveg és az ábrák elsőrendű nyomda-technikai megjelenítése.

(V. Sz.)

**Jan Weiland—Hans Wilhelmsson:  
Coherent Nonlinear Interaction of Waves in Plasmas  
International Series in Natural Philosophy, Vol. 88  
Pergamon Press Oxford, New York, 1977**

A plazmafizikai fejlődését nagymértékben befolyásolták a termonukleáris energiatermelést célzó kutatások és a lézersugárral kapcsolatos vizsgálatok. Mindkét területen szembeszökővé váltak azok az elméleti nehézségek, amelyek a feltárt törvényszerűségek nemlineáris jellegéből fakadtak. Bár a nemlinearitás általános értelemben vett legyőzésétől még távol vagyunk, a legtöbb területen kialakultak gyümölcsöző módszerek a hullámjelenségekkel kapcsolatos nemlineáris jelenségek leírására. Szerzők, a göteborgi Chalmers Egyetem kutatói, e kötetben kísérletet tesznek arra, hogy a plazma hullámok nemlineáris kölcsönhatásait egységes módszerrel tárgyalják, szemben az eddig tapasztalt „ad hoc” eljárásokkal. A 368 oldalas monográfia felépítése a következő: Egyszerű nemlineáris feladatok — A móduscsatlás elmélete — Az elektromágneses ténergia diszperzív rendszerben — A nemlineáris hullámegyenlet felállítása nemlineáris áramokkal — Példák három hullám kölcsönhatására plazmákban — Energiaviszonyok — Negatív energiájú hullámok — Analitikus megoldások móduscsatlott egyenletek esetén — Stabilitási feltételek és aszimptotikus viselkedés a három kölcsönható hullám általános esetére — Explozív instabilis eset — Lineáris csillapítások



szerpe — Explozívan instabil kölcsönhatás egy elektromágneses hullám és három plazmahullám között — Feladatok az egyes fejezetekhez és megoldási útmutató. A kötet az alapvető irodalom mellett a legfrisebb irodalmi hivatkozásokat is közli.

(Abonyi Iván)

**J. A. De Santo, (ed.): Ocean Acoustics**  
**Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York**  
**Topics in Current Physics Vol. 8. 1979**

A kötet az óceánok akusztikájával, pontosabban az óceánokban a hangterjedés egyes jelenségeivel foglalkozó tanulmányok gyűjteménye. A szerkesztő maga is részt vállalt az előszóból és hét dolgozattól álló anyag fölépítésében, amennyiben a bevezetést (a könyvben ez az első fejezet) és a második — elméleti — fejezetet ő írta.

A bevezetés bőven tartalmazza mindazon tudnivalókat, amikkel a témával eddig nem foglalkozó olvasó alapismereteit ki kell egészíteni. Általában kétféle szempontból foglalkoznak óceáni akusztikával. Tanulmányozhatók azok a hatások, amelyek a hang terjedésére és a kialakult hangtérre befolyással vannak. Ilyenek a belső áramlások, összetétel, gravitációs változások stb. Ez a tárgyalási mód inkább az oceanográfusok módszere. Szemléletesen másfajta problémafölvétel a hangtér torzulásaival „letapogatni” az óceánokban végbemenő fizikai változásokat. Ez a víz alatti akusztikusok érdekerőtere. Természetesen ugyanazzal a jelenségsoporttal állunk szemben, csak a cél különbözik.

Bár a víz alatti akusztikában 1 Hz és 300 kHz közötti frekvenciák tartoznak a tudományos érdeklődés körébe, a nagyobb frekvenciákat a kis terjedési távolság miatt nem igen használják. Így aztán csak néhány kHz a gyakorlati felső határ. A mély hangok szerepe nemcsak a szeizmikus hullámok vízalatti terjedése miatt, hanem a víz alatti hangvezető csatornák fölfedezése óta információ-technikai szempontból is nagyon fontossá vált.

Amellett mind a tengerek felületéről, mind az óceánok fenekéről, valamint a víz alatti hőmérséklet, sótartalom, áramlás, idegen test, biológiai és/vagy technikai zörejek stb. adatairól főként csak akusztikai módszerekkel szerezhetünk tudomást. Mindez technikai megvalósítás szempontjából nem régebbi, mint 40 éves tudományzak.

Végeredményben a könyv célkitűzése az óceán bármilyen homogén vagy inhomogén változása és a hangterjedés sajátosságai közötti korrelációk elemzése. Az eredményeket részben elméleti megfontolások, részben helyszíni kísérleti vizsgálatok, részben pedig különféle modellek tanulmányozásai szolgáltatják. A modellek akár számítástechnikaiak, akár kicsinyített térfogatú vizes tankok lehetnek. A szerzők igyekeztek részben a tudományszak alapjait ismertetni, részben pedig a jelenlegi tudományos állapotot közölni.

A 2. fejezetnek a címe is elárulja, hogy az elméleti alapokkal foglalkozik. Azonban az erős matematikai apparátus nemcsak ennek a De Santo által írt fejezetnek sajátja. A 3. fejezet szerzői (F. R. Di Napoli és R. L. Deavenport) a víz alatti hangterjedés számszerű modelljével foglalkoznak. A második fejezettel együtt ez képezi a munka gerincét. Igen nagy fölkészítéssel és alig követhető matematikai formalizmussal megírt monográfia. Fizikai modellezés, a 4. fejezet témája, amiben többek között a kicsinyített modellekben való vizsgálatok problémái is benn foglaltatnak. Ezt J. G. Zornig foglalta össze. Rövid fejezetben ír J. P. Dugan az oceanográfia szempontjairól. A 6. fejezet ismét erősen elméleti: N. Bleistein és J. K. Cohen lényegében a vízalatti ionhomogenitások kimutatásának inverz módszerével foglalkozik benne. Végül a 7. fejezetben a rendkívül nagy gyakorlati jelentőségű vízalatti tér-idő skálákkal foglalkozik R. P. Porter.

A szerzők valamennyien amerikaiak, egy részük a Naval Underwater Systems Center-ben dolgozik, mások a denveri vagy más amerikai egyetemeken, ill. kutatóintézetekben működnek. Kutatási területük összehangolt, matematikailag kitűnő fölkészítettségűek és a téma irodalmát a legmagasabb szinten ismerik. A másik nagy óceánkutató gárdának a szovjetunióbeli kollégáknak munkáit — fordításból — jól ismerik és elég sokszor idézik.

Ha valaki erről a különleges tudományos területről biztos fogalmakat akar nyerni, az ismertett könyvet igen jó kalauzként forgathatja.

(T. T)



**J. M. Blatt és V. F. Weisskopf: Theoretical Nuclear Physics  
Springer-Verlag, 1979**

„Az elmúlt húsz esztendő tanúja volt a magfizika hatalmas fejlődésének.” Ezzel a ténymegállapító mondattal kezdődik az Elméleti Magfizika előszava. Az elmúlt húsz esztendőben a magfizika valóban hatalmasat fejlődött, csak hogy az idézett mondatot 1952-ben fogalmazták meg. Arról van szó ugyanis, hogy a Springer Verlag, több mint negyed század után egyetlen betű megváltoztatása nélkül, újra kiadta az elméleti magfizika bibliáját, a híres „Blatt-Weisskopf”-ot, amely először a John Wiley and Sons Kiadónál jelent meg 1952-ben. Hangsúlyozni kell, hogy a Springer Kiadó ezzel a kötettel nemcsak tudománytörténeti missziót teljesített, hanem a valóságos olvasói — felhasználói igényt kielégítve hiányt is pótol, hiszen a magfizikai szakirodalomban az „Elméleti Magfizika” még ma is az egyik leggyakrabban idézett forrásmunka.

Érdekes felsorolni a könyv fejezet címeit, mert ez önmagában meggyőz bennünket arról, hogy egy „modern” szemléletű könyvvel van dolgunk:

- I. A mag általános tulajdonságai
  - II. Két-test problémák alacsony energián
  - III. Magerők
  - IV. Két-test problémák nagy energián
  - V. Három- és négy-test problémák
  - VI. Magspektroszkópia: (I) Általános elmélet
  - VII. Magspektroszkópia: (II) Speciális modellek
  - VIII. Magreakciók: Általános elmélet
  - IX. Magreakciók: Az elmélet alkalmazása a kísérletekre
  - X. A magreakciók formális elmélete
  - XI. A magok spontán bomlása
  - XII. Magok kölcsönhatása az elektromágneses sugárzással
  - XIII. Béta bomlás
  - XIV. A mag héjszerkezete
- Függelék A: Impulzus nyomoték operátorok és saját függvények  
Függelék B: Multipól sugárzás

A „Blatt-Weisskopf” megjelenése óta eltelt évek nem cáfolták meg a könyvnek szinte egyetlen megállapítását sem, a benne foglalt feltevések zömét viszont fényesen igazolták. Ez az egyik magyarázata annak, hogy változtatás nélkül lehetett újra kiadni. A másik magyarázat abban rejlik, hogy ez a könyv kitűnően illusztrálja, hogy hogyan lehet és kell az elmélet inductív eszközeit használni egy tudományág fejlődésének azon korai szakaszában amikor még, átfogó elmélet híján, a deduktív módszerek eleve ki vannak zárva.

Ilyen szempontból a „Blatt-Weisskopf” hasznos olvasmány lehet a magfizikától különböző tudományág iránt érdeklődők számára is. (L. I.)

**Lane P. Hughston: Twistors and Particles  
Lecture Notes in Physics, 97  
Springer, 1979 (153 l.)**

Az oxfordi Mathematical Institute társalgójából pompás kilátás nyílik egy szemközti ház falára mázolt felíratra: „Ne feledd, mit történt a dinoszauruszokkal!”. Ez az évről-évre megújított lözung — úgymond — egyáltalán nem az Intézet undergraduate hallgatóinak okolasául szolgál. Magam, érzékenyebb vendég szabadon társíthat még újabb kori részecskefizikai elméletekre. Utóbbiaknak a története bővelkedik dinoszauruszokban.

Az említett társalgóban formálódott a tvisztorelméletnek néhány részecskefizikai fejleménye, amelyeket most a Twistors and Particles című kötet foglal össze. Mindenekelőtt elvezeti az Olvasót azok táborába, akik tisztában vannak a tvisztorelmélet alapfogalmaival. További fejezetek a tvisztorkvantálási szabályokkal, majd a részecskemodellezés tvisztorelméletével foglalkoznak. Az elmélet alap gondolata, hogy a részecskét formálisan zérus tömegű komponensekre hasítjuk. Ez a felbontás belső szimmetriacsoportokat hoz létre, amelyek biztató egyezésekhez vezetnek a megfigyelt részecskespektrum szimmetriáival.

A legegyszerűbb tvisztormodellek nem mentesek bizonyos nehézségektől: például az  $\omega - \varphi$  rendszert nem képesek felbontani. E problémák megoldása izgalmas felismerésekhez vezetett. Közöttük említésre érdemes Wigner Jenő unitaritástételének a magfizikában már korábban megismert megsérülése.



Mint a fizika kiemelkedő fejlődési szakaszai általában, az elmélet matematikai alapjait illetően új szemlélet kialakulását hozzák magukkal a tvisztorok. „The momentum of the mind is all toward abstraction” (Az értelem egyre az elvonatkoztatás felé lendül). Wallace Stevens mondása e kötet mottója. A kvantumfizikai állapotfüggvények nem egyszerűen Hilbert-tér elemei, hanem kohomológia-csoportokéi. A kötet második része bevezetést nyújt a kohomológia bizonyos elemi módszereibe, majd ennek nézőpontjából veszi újra szemügyre a tvisztorkvantálás módszerét. A több-tvisztor-rendszerek kohomológiájával elérkezünk a megoldott kérdések frontvonalához és e kötet végéhez.

A kritikus elméjű olvasó méltán kifogásolja, hogy a tvisztorelmélet részecskemodelljei — abban az állapotukban, ahogyan azokat Hughston összefoglalja — több olyan kérdésre adósok maradnak a válasszal, amelyekre egyéb részecskefizikai koncepciók részletekbe menő jóslatokkal szolgálnak. De ezeknek a részleteknek a nyilvánvaló hiánya talán nem túl nagy ár, ha az elmélet dinoszauruszmentes marad.

*Perjés Zoltán*

**W. Beiglöck (ed.): Stochastic Behavior in Classical and Quantum Hamiltonian Systems**  
**Lecture Notes in Physics 93**  
**Springer-Verlag 1979**

Az utóbbi két évtizedben különböző tudományágakon belül is az érdeklődés előterébe került az a tény, hogy szigorúan determinisztikus, nemlineáris rendszerek teljesen kaotikus viselkedést is mutathatnak. Az eltérő tudományterületeken dolgozó kutatók csak nagyon nehezen szerezhettek tudomást egymás hasonló témájú eredményeiről. Ezért vált szükségessé, hogy 1977-ben (Comoban) megrendezzék az első nemzetközi konferenciát a klasszikus és kvantum Hamiltoni rendszerek sztochasztikus viselkedéséről, melyen a kérdéskörrel foglalkozó matematikus, fizikus, csillagász, biológus és közgazdász szakemberek vettek részt. A kötet a konferencián elhangzott fizikai és matematikai témájú előadások anyagát tartalmazza.

Az első rész a klasszikus fizikai rendszerekkel foglalkozik. Már egészen egyszerű (néhány szabadsági fokú) nemlineáris rendszerekben is megfigyelhető, hogy a fázistérbeli trajektóriák olyan kaotikusak, hogy ez a determinisztikus mozgás alig különböztethető meg egy teljesen véletlen mozgástól. Ilyenkor beszélünk a Hamiltoni rendszer sztochasztikus viselkedéséről. Az egyik legjobban ismert ilyen tulajdonságú modell rendszer az ún. Hénon—Heiles-modell, ami nem más, mint két egydimenziós oszcillátor speciális köbös kölcsönhatással. A közölt cikkek közül több is foglalkozik töltött részecskék különböző típusú hullámokban történő mozgásával, ill. a kialakuló sztochasztikus viselkedéssel. Ennek ismerete alapvető fontosságú a magfúzióval kapcsolatos plazmafizikai kutatásokban. A tisztán matematikai cikkek kivül találkozunk kristályfizikai, lézerfizikai és csillagászati alkalmazásokkal is.

A második rész a kvantum rendszereket tárgyalja különös tekintettel arra a problémára, hogy hogyan kvantálható a klasszikusan kaotikus viselkedésű nemlineáris rendszer. A kérdéssel kapcsolatos nehézségekre Einstein már 1917-ben felhívta a figyelmet, a probléma azonban feledésbe merült, s csak az utóbbi időben került ismét előtérbe. A kötetben megismerkedhetünk e témakörrel kapcsolatosan több kutató legújabb eredményeivel is. Az alkalmazások közül itt főleg a több atomos molekulák spektrumának számítása jelentős.

A kötet elsősorban a matematikai-fizika iránt érdeklődők figyelmébe ajánlható, de interdiszciplináris jellegénél fogva szélesebb olvasóközönségre is számíthat.

*Tél Tamás*

**W. Beiglöck, A. Böhm és E. Takasugi (ed.)**  
**Group Theoretical Methods in Physics Proceedings, Austin, 1978**  
**Lecture Notes on Physics sorozat 94. kötet**  
**Springer-Verlag, 1979**

Ez a kötet a VII. Nemzetközi Csoportelméleti Konferencia anyagát tartalmazza. A kollokviumot Integrált Csoportelmélet és Matematikai Fizika Konferenciaként rendezték meg az egyesült államokbeli Austinban a Texas Egyetemen 1978 szeptemberében. A konferencián a fizika, a matematika és a kémia legkülönbözőbb területein dolgozó tudósok vettek részt akinek munkája a csoportok általános elméletével és reprezentációival kapcsolatos. A konferencia fő célja az volt, hogy



a különböző területen dolgozó, de hasonló, vagy egymáshoz kapcsolódó módszereket használó tudósok kicserélhessék gondolataikat.

A konferencia két egyforma fontosságú részre tagolódott:

1. Áttekintő előadások, amelyek a teljes hallgatóság számára ismertetik a mindenki számára hasznos új eredményeket;

2. Részletkérdésekkel foglalkozó előadások, amelyeket speciális üléseken vagy posztterek formájában ismertettek.

Ez a felosztás a kötetben is felismerhető. Az áttekintő előadásokat teljes terjedelmükben közlik, majd ezt követik a részletkérdésekkel foglalkozó előadások rövid összefoglalói.

A kötet a különböző üléseknek megfelelő fejezetekre bomlik, a különböző fejezeteket az ülések szervezői és a kötet kiadói rendezték nyomda alá. Az egyes fejezetek és szervezőik valamint az áttekintő előadásokat tartó tudósok neve:

1. Mértékcsoportok és szolitonok, szervező: L. O. Raifeaigh, áttekintés: D. Campbell és R. Jackiw;

2. Uniter csoport az atom, molekula és szilárdtest fizikában, szervező: A. Jahner, P. Kramer és F. Matsen, összefoglalók: J. D. Louck és J. Paldus;

3. Szálynalábok és kiterjedt részecske szerkezet, szervező: A. Böhm, összefoglalók: W. Drechsler, V. G. Kadyshevsky, F. Mansouri és R. N. Sen;

4. Csoportelmélet a kvantummechanikában, szervezők: A. O. Barut, M. Moshinsky, E. P. Wigner és P. Winternitz; összefoglalók: H. van Dam, M. Moshinsky és J. Patera;

5. Csoportok és félcsoportok használata a bomló rendszerek leírására, szervező: L. P. Horwitz, összefoglalók: H. Baumgärtel, L. Fonda, V. Gorini és A. P. Grecos;

6. Szimplektikus struktúrák és geometriai kvantálás, szervező: K. Bleuler és A. Lichnerowicz, összefoglalók: F. Bayen, M. J. Gotay, A. Lichnerowicz és J. Czyz;

7. Spektrumgeneráló csoportok, szervező: J. Werle, összefoglalók: A. Böhm, A. Garcia;

8. Alfréd Schild emlékülés a csoportelmélet alkalmazásáról az általános relativitáselméletben, szervezők: J. Plebanski és J. A. Wheeler, összefoglalók: J. N. Goldberg, T. Regge, C. Teitelboim és F. J. Ernst;

9. Csoportelmélet a magfizikában, szervezők: A. Arima és L. C. Biedenharn, összefoglalók: J. B. French, K. T. Hecht és F. Iachello;

10. Szupergravitáció és gradált Lie-algebrák, szervezők: Y. Née-man és S. Sternberg, összefoglalók: V. G. Kac, Y. Ilamed, N. R. Ranganathan;

11. Csoportelmélet a részecskefizikában, szervezők: I. Pasupathy és E. C. G. Sudar, összefoglalók: A. O. Barut, S. K. Bose, F. Gürsey és C. C. Chiang.

A konferencia emlékeztető eseménye az volt, amikor a Csoportelmélet és Alapvető Fizika Alapítvány által létrehozott Wigner Emlékérmeket átadták az érem névadójának Wigner Jenő professzornak és közvetlen munkatársának V. Bargman professzornak. A magyar olvasó számára különösen örömdetes eseményről részletesen tájékoztat a kötet. Megtalálható benne A. Böhm Wigner Jenőt méltató beszéde és Wigner Jenő V. Bargmant méltató előadása. A fizikortörténetileg fontos eseményt megőrzítő fényképek is megtekinthetők a kötetben.

A könyv anyaga rendkívül érdekes áttekintést adja a csoportelmélet fejlődésének és lehetséges alkalmazásainak. A cikkek jó részének megértéséhez az egyetemen megszerezhető ismereteken túlmenő speciális tudásanyag szükséges. Tanulságos olvasmány lehet a területen dolgozó matematikus, mind a legkülönbözőbb érdeklődésű fizikus számára. Úgy tűnik az átfogó konferenciák rendszere szerencsés gyakorlattá vált a csoportelmélet témán dolgozó szakemberek számára.

Budapest, 1979. október 5.

Horváth Zoltán

**S Haykin (ed.): Nonlinear Methods of Spectral Analysis  
Topics in Applied Physics. Vol. 34  
Springer, Berlin-Heidelberg-New York 1979**

A hat jól és világosan megírt fejezetet tartalmazó kötet valószínűségi spektrumok, túlnyomórészt egymást követő diszkrét események, elemzésével foglalkozik. Az egyes fejezeteket a tárgyalt kérdések jó nevű szakértői írták (S. Haykin, S. Kessler, T. J. Ulrich és M. Ooe, E. A. Robinson, J. Capon, R. N. McDonough).

Az első fejezet mindenekelőtt az idősor fogalmát azonos időközökben ( $n \Delta t$ ,  $n=1, 2, 3$ ) végzett megfigyelések, illetve mintavételek egymásutánjaként definiálja. Valamely nem determinisztikus sor jövőbeli értékei valamilyen valószínűségi eloszlással adhatók meg. Az autokorrelációs



és autokovariáns függvények definíciója után a fejezet a spektrum sűrűségeloszlását az autokorrelációs függvény Fourier-transzformáltjaként vezeti be.

Az idősor matematikai kezelését szűrésnek (filter) nevezett kalkulációs módszer egyszerűsíti, mely a bevitt értékeket konvolúciós összeggé transzformálja. A sztochasztikus folyamatok modellezése azon az elgondoláson alapul, hogy egy idősor egymásután következő, egymástól függő értékei a sor egymástól független impulzusaiból generálhatók. Az első fejezet definiálja továbbá az autoregresszió (AR), a változó átlag (moving average: MA) és autoregresszív változó (autoregressive moving average, ARMA) fogalmakat és röviden összefoglalja a valószínűségi spektrálanalízis lineáris és nem lineáris módszereit. A kötet további (2.—6.) fejezetei a nemlineáris módszerekkel foglalkoznak.

A 2. fejezet a maximum-entrópia módszert (MEM) ismerteti. Kiindulásul egy olyan spektrumot kell választani, melynek idő sora maximálisan esetleges s melynek autokorrelációs függvénye ismert értékek egy sorozatával egyezik. A módszer nevét onnan kapta, hogy a sor generálási feltétele az információ elméletben használatos maximális entrópia fogalmának felel meg. A módszer jól használható viszonylag kevés számú adat értékelésére. A 3. fejezet az AR és ARMA módszerek részletes tárgyalását tartalmazza. A 4. fejezet az ARMA értékelés legkisebb négyzetek módszerével való közelítéssel foglalkozik és jól számolható algoritmust ismertet. Az 5. fejezet (maximal likelihood spectral estimation) hullámszám spektrumok frekvenciájának mérését, illetve becslési módszerét diszkutálja. A mozgó hullámok tulajdonságait valamilyen rendszer szerint elhelyezett detektorok érzékelik. A módszer az érzékelt adatok lehető pontos besorolására vonatkozik. Végül a 6. fejezet térben elhelyezett érzékelő rendszerektől érkező adatoknak a maximum likelihood, illetve maximum entrópia módszerrel történő feldolgozását tárgyalja.

A könyv az ismertetett témáknak világos és könnyen olvasható áttekintését adja. Minden fejezet gyakorlati problémákat is tárgyal (pl. földfelszíntől, időjárási zavaroktól, repülő madárrajtól torzított radar jelek, földrengések szeizmikus jeleinek értékelése stb.). Az egyes fejezetek végén található több mint 200 irodalmi hivatkozás a téma egész irodalmát dolgozza fel 1979-ig.

A tárgyalt módszerek sztochasztikus folyamatok széles körének elemzésére használhatók. Haszonnal tanulmányozhatják mindazok, akik kutatási módszereiket optimális szempontok figyelembevételével kívánják tervezni. Azok az olvasók is igen hasznosnak fogják találni a könyvet, akik üzemi analitikai és mikroanalitikai módszerek racionális fejlesztésével, mérőhálózatok nagyszámú adata maximális információtartalmának feltárásával foglalkoznak. Ebben a vonatkozásban különösen jelentősnek tűnik az ismertetett módszerek környezetvédelmi analitikai, valamint mérőhálózati adatok feldolgozására való hasznosítása.

*Morlin Zoltán*





A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója  
Műszaki szerkesztő: MARTON ANDOR  
80-591 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató  
A kézirat nyomdába érkezett: 1980. I. 21. Terjedelem: 10,15 (A5 iv)









## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Lovas Rezső</i> : Nukleon és mag töltéscserélő kölcsönhatása .....	225
---	-----

## A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>P. A. M. Dirac</i> : Sugárzás kibocsátásának és elnyelésének kvantumelmélete .....	305
---	-----

## KÖZLEMÉNY

<i>Zolnai László</i> : Az MTA Atommagkutató Intézete jubileumi nemzetközi pályázatának eredménye .....	325
--	-----

## KÖNYVISMERTETÉS

<i>M. Cardona and L. Ley (ed.)</i> : Photoemission in Solids II. ....	327
<i>S. Barisic, A. Bjelis, J. R. Cooper, B. Leontic (ed.)</i> : Quasi-one-Dimensional Conductors I—II. ....	327
<i>T. S. Huang (ed.)</i> : Picture processing and digital filtering .....	328
<i>S. Albeverio, Ph. Combe, R. Høegh—Krohn, G. Rideau, M. Sirugue-Colin, M. Sirugue és R. Stora (ed.)</i> : Feynman Path Integrals .....	328
<i>Ph. A. Martin</i> : Modeles en Mécanique Statistique des Processus Irreversibles .....	330
<i>A. Martin-Löf</i> : Statistical Mechanics and the Foundations of Thermodynamics .....	330
<i>W. Walcher</i> : Praktikum der Physik .....	331
<i>D. Smidt</i> : Reaktor-Sicherheitstechnik .....	331
<i>S. Villani (ed.)</i> : Uranium Enrichment .....	332
<i>Jan Weiland—Hans Wilhelmsson</i> : Coherent Nonlinear Interaction of Waves in Plasmas .....	332
<i>J. A. De Santo (ed.)</i> : Ocean Acoustics .....	333
<i>J. M. Blatt és V. P. Weisskopf</i> : Theoretical Nuclear Physics .....	334
<i>Lane P. Hughston</i> : Twistors and Particles .....	334
<i>W. Beiglböck (man. ed.)</i> : Stochastic Behavior in Classical and Quantum Hamiltonian Systems .....	335
<i>W. Beiglböck, A. Böhm és E. Takasugi (ed.)</i> : Group Theoretical Methods in Physics .....	335
<i>S. Heykin (ed.)</i> : Nonlinear Methods of Spectral Analysis .....	336

307 226

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

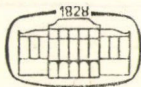
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR  
ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
PÁL LÉNÁRD

XXVIII. KÖTET

4. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1980



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10-10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár

Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII. Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 72 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázó szöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

# AZ ALKÁLI KLORIDOK VIZES OLDATAINAK SZERKEZETVIZSGÁLATA RÖNTGENDIFFRAKCIÓVAL\*

RADNAI TAMÁS

MTA Központi Kémiai Kutató Intézete, Budapest

## TARTALOM

Bevezetés .....	339
1. Vizes elektrolit oldatok röntgendiffrakciós vizsgálata .....	340
1.1. Definíciók .....	340
1.2. A többkomponensű folyadékok röntgenszórásának leírása .....	343
1.3. Az oldatok szerkezete, a röntgendiffrakciós módszerrel nyerhető információk .....	345
1.4. A radiális eloszlások analízisének néhány problémája .....	347
2. Az alkáli kloridok vizes oldatainak szerkezeti problémái .....	351
2.1. Irodalmi előzmények .....	351
2.2. Nyitott kérdések az alkáli halogenid oldatok vizsgálatában .....	354
3. Az alkalmazott mérési és adatfeldolgozási módszer .....	355
3.1. A szórt röntgensugár intenzitáseloszlásának mérése transzmisszióban .....	355
3.2. Korrekciók, normalizálás és a redukált intenzitások előállítása .....	357
3.3. Az adatfeldolgozás technikája .....	363
4. A kísérleti redukált intenzitások és a radiális eloszlások diszkussziója (kvalitatív leírás) ....	363
5. Az első szomszéd-modellezés és a kapott szerkezeti paraméterek .....	366
5.1. Az első szomszéd-modellek leírása .....	366
5.2. A modellek illesztése a kísérleti függvényekhez. A nyert szerkezeti paraméterek .....	369
5.3. A paraméterek értelmezése és kritikai értékelése .....	372
Irodalom .....	375

## BEVEZETÉS

A röntgendiffrakciós kísérletből nyerhető folyadékszerkezeti információkat maga a mérési módszer erősen korlátozza. Eleve csak olyan ismereteket szerezhethünk, amelyek a szórt röntgensugarak intenzitásával kapcsolatba hozhatók. A korlátozó tényezők között vannak olyanok, amelyek a vizsgált anyag szerkezetétől függetlenek. Ilyen tényezők pl. a használt sugárzás hullámhossza, amely megszabja a „látható” méreteket; az anyag erős abszorpciója; zavaró fluoreszcens sugárzás stb. A mérési technika megfelelő megválasztásával azonban ezek a feltételek jelentős mértékben befolyásolhatók.

Léteznek viszont olyan korlátozó tényezők is, amelyek a vizsgált anyag szerkezeti tulajdonságaival vannak kapcsolatban. Ezek hatása olyan, hogy a szórt röntgensugarak intenzitáseloszlási képét teszi bonyolulttá, vagy egyáltalán nem kiértékelhetővé. Ez a helyzet a bonyolult molekulákat vagy több komponenst tartalmazó folyadékok esetében. Ilyenkor a szerkezet jellemzése, a szerkezeti paraméterek meghatározása csak igen pontatlanul, vagy egyértelmű módon egyáltalán nem is

\* Érkezett 1979. jún. 30.



lehetséges. Minél bonyolultabb a rendszer, annál több előzetes feltevés, közelítés felhasználása válik szükségessé. Ez viszont azt jelenti, hogy az eredmények is korlátozott érvényűek lesznek.

Ugyanakkor igaz egy fordított megállapítás is: minél egyszerűbb a vizsgált amorf anyag szerkezete, annál nagyobb biztonsággal lehetséges annak megismerése röntgendiffrakciós módszerrel. Az anyag részecskéi közötti távolságok például gyakran  $0,01\text{--}0,1\text{ \AA}$  pontossággal meghatározhatók, és más biztos következtetések is levonhatók igen sok folyadék rövid távú rendezettségére vonatkozóan.

A módszer eme kettős arculatát kívánom bemutatni az alkáli klorid sók vizes oldatainak példáján. Méréseim a MTA Központi Kémiai Kutató Intézetének Amorfröntgendiffrakciós csoportjában évek óta végzett kutatómunka részét képezték. A kiválasztott oldatok egyszerűek, látszatra nem tartogatnak különösebb meglepetést. A szerkezetanalízis azonban — később ismertetendő okokból — a legkevésbé sem problémamentes. Többek között ez indokolja a korábbi szerkezetvizsgálatok nagy számát. Az oldatszerkezet igényes vizsgálatához végül is az utóbbi években kifejlesztett modern kísérleti és adatfeldolgozási technika segítségével, valamint a szerkezet modellezésére alkalmazott új módszerekkel lehetett eljutni.

## 1. Vizes elektrolit oldatok röntgendiffrakciós vizsgálata

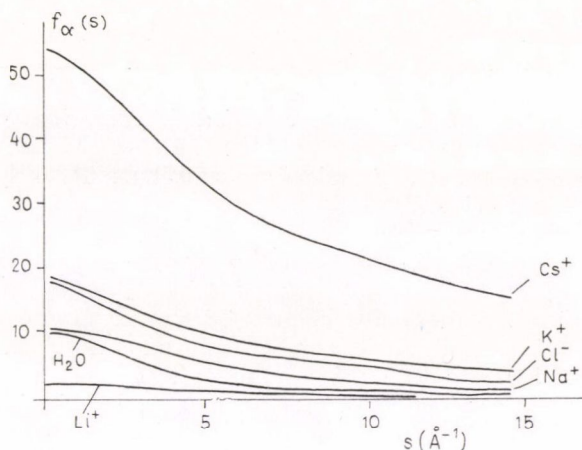
### 1.1. Definíciók

Jelen dolgozatban a *többkomponensű vizes oldatok* megjelölés olyan oldatokra utal, amelyekben a vizen, mint oldószeren kívül legalább két másik komponens is található, továbbá ezek röntgenszórása az összintenzitásban jelentős nagyságú járulékot ad. Ezek a járulékok azonban nem választhatók eleve szét, annak ellenére, hogy az egyes részecskék szóróképessége jól ismert. Az egyes komponensek szerepe a szórásban az egész oldat szerkezetének felderítésével párhuzamosan határozható meg. Jó példa erre a hidrogénatomok felismerése és a tőlük mért távolságok meghatározása. Közismert, hogy a röntgendiffrakciós módszer a hidrogénatomok lokalizálására kevésbé alkalmas. A víz szerkezetének vizsgálatakor azonban, ha nem várható is az egyes hidrogénatomokból mért távolságok pontos meghatározása, de lehetséges annak eldöntése, hogy a független — oxigén és hidrogén — atomi centrumokból álló képelt vízmolekulákból vagy a molekuláris  $\text{H}_2\text{O}$  egységekből felépített vízszerkezet áll-e közelebb a valósághoz. Koncentrált elektrolit oldatokban azonban már a többi járulék az ilyen finomabb különbségeket elnyomja, ezért az oldószert molekuláris egységekből állónak tekintjük, és a hidrogént nem vesszük külön komponensként számításba.

Eszerint az alkáli klorid oldatokat három komponensből állónak tekintjük. Az 1. ábrán az egyes szóróegységek (alkáli kationok, klorid ionok és vízmolekulák) szórási amplitúdóinak  $s$  függése látható ( $s$  az ún. szórási változó).

A továbbiakban a „részecske” szó egyaránt jelenthet molekuláris-atomi- vagy ionos szórócentrumot. A megkülönböztetés úgy történik, hogy a részecske koherens szórásjárulékának kiszámításához a megfelelő molekuláris-atomi vagy ionos szórási amplitúdót használjuk.

Mint később megmutatjuk, a szórt intenzitásban az egyes távolságok járulékaiknak nagysága függ az *oldat komponenseinek sztoichiometriai arányától*, azaz a kon-

1. ábra. A szórás amplitúdók  $s$ -függése

centrációtól. Szórás szempontból a víz a többivel egyenjogú komponensnek tekinthető, nincs valamiféle „preferált” szerepe, annak ellenére, hogy az intenzitásba adott járuléka kvantitatíve túlnyomó lehet. Az oldatok koncentrációja a dolgozatban mindenütt molalitásban kifejezve értendő, azaz mól/1000 g víz egységeiben.

A sztöchiometriai egység fogalma az oldatok esetében erőltetett, a levezetéshez mégis célszerű alkalmazni. Látni fogjuk azonban, hogy a szórt intenzitást leíró formulák végül is függetlenek lesznek a kiindulási egységtől.

Legyen tehát a sztöchiometriai egység az oldat akkora mennyisége, amelyben minden komponens részecskéiből legalább 1 (de nem feltétlenül egész számú) megtalálható. Ha az oldatban  $n$  ilyen egység van, és egy egységben összesen  $m$  részecske, az oldatban levő összes részecske száma  $N = nm$ . Ha az oldat térfogata  $V$  ( $\text{\AA}^3$  egységeiben), akkor a benne levő részecskék átlagos sűrűsége

$$\varrho_0 = \frac{N}{V} = \frac{nm}{V} \left( \frac{1}{\text{\AA}^3} \right). \quad (1)$$

Az oldatban levő részecskefajták számát, azaz az oldat komponenseinek számát jelölje  $\mu$ , és sorszámozzuk az egyes fajtákat az  $\alpha$  indexszel 1-től  $\mu$ -ig. További jelölések:  $n_\alpha$  az  $\alpha$  típusú részecskék száma a sztöchiometriai egységben,  $N_\alpha$  az  $\alpha$  típusú részecskék száma az oldatban,  $\varrho_\alpha$  az  $\alpha$  típusú részecskék átlagos sűrűsége az oldatban,  $x_\alpha$  az  $\alpha$  típusú részecske móltörtje.

Ekkor helytállóak az alábbi triviális definíciók, ill. azonosságok:

$$\sum_{\alpha=1}^{\mu} n_\alpha = m, \quad \sum_{\alpha=1}^{\mu} N_\alpha = N, \quad N_\alpha = nm_\alpha \quad (2)$$

$$\varrho_\alpha = \frac{N_\alpha}{V} \quad \text{és} \quad \sum_{\alpha=1}^{\mu} \varrho_\alpha = \varrho_0 \quad (3)$$

$$x_\alpha = \frac{n_\alpha}{m} = \frac{nm_\alpha}{nm} = \frac{N_\alpha}{N}, \quad \sum_{\alpha=1}^{\mu} x_\alpha = 1, \quad \varrho_\alpha = \frac{N_\alpha}{N} \cdot \frac{N}{V} = x_\alpha \varrho_0. \quad (4)$$



A (4) egyenletben már a konkrét sztohiometriai egységválasztástól független mennyiségek szerepelnek! A továbbiakban ezekkel fejezzük ki a szórásra és a szerkezetre jellemző függvényeket.

Most áttérünk a részecskék oldatbeli eloszlását jellemző függvények definiálására. Annak valószínűsége, hogy valamely  $i$  indexű részecskét az  $\mathbf{R}_i$  helyvektor és  $dV_i$  térfogatelem, valamint a  $j$  indexű részecskét az  $\mathbf{R}_j$  helyvektor és  $dV_j$  térfogatelem jellemez egyidejűleg,

$$dP_{ij}(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) = W_{ij}(\mathbf{R}_{ij}) \frac{dV_i dV_j}{V^2}, \quad (5)$$

ahol  $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$  és a  $W_{ij}$  függvény írja le az  $i, j$  indexű részecskék korrelációját. A lehetséges  $\{i, j\}$  választások közül azonban az azonos fajtájúak  $\{\alpha, \beta\}$  választásaihoz tartozó távolságok között számos azonos lesz, ezért a korrelációs függvények csak a részecskék *fajtajától* függenek, és nem az individuális részecskéktől. Feltételezve továbbá, hogy az  $\mathbf{R}_{ij}$  vektorok eloszlása gömbszimmetrikus, azaz a korrelációs függvények csak az  $|\mathbf{R}_{ij}| = R_{ij}$ -től függenek (ez például molekuláris folyadékoknál már nem mindig teljesül!), a fenti valószínűség így írható:

$$dP_{ij}(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) = g_{\alpha\beta}(R_{ij}) \frac{dV_i dV_j}{V^2}, \quad (6)$$

ahol a konvenció kedvéért a  $g_{\alpha\beta}$ -val jelöltük az  $\alpha$  és  $\beta$  típusú részecskék *pár-korrelációs függvényét*.

Ha az origót egy  $\alpha$  típusú részecske helyére képzeljük, és folytonos  $R$  változót vezetünk be, annak valószínűsége, hogy az origótól egy  $\beta$  típusú részecske  $R$ , illetve  $R+dR$  távolság között van,

$$dP_{\alpha\beta}(R) = g_{\alpha\beta}(R) \frac{4\pi R^2 dR}{V}. \quad (7)$$

E helyett a valószínűségeloszlási függvény helyett azonban inkább a következő ún. *radiális eloszlási függvényt* (REF) szokták bevezetni:

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta}(R) &= N_\beta \frac{dP_{\alpha\beta}(R)}{dR} = \frac{N_\beta}{N} \cdot \frac{N}{V} 4\pi R^2 g_{\alpha\beta}(R) = \\ &= 4\pi R^2 x_\beta \varrho_0 g_{\alpha\beta}(R) = 4\pi R^2 \varrho_\beta g_{\alpha\beta}(R). \end{aligned} \quad (8)$$

Jelentése: a központi,  $\alpha$  típusú részecskétől az  $R$  távolságban levő,  $dR$  vastagságú gömbhéjban található  $\beta$  típusú részecskék száma. A függvényt  $R$  szerint integrálva alkalmasan választott  $R_1$  és  $R_2$  értékek között az  $\alpha$  típusú atomot körülvevő  $\beta$  részecskék számát, a *koordinációs számot* kapjuk:

$$c_\beta = \int_{R_1}^{R_2} D_{\alpha\beta}(R) dR = \varrho_\beta \int_{R_1}^{R_2} 4\pi R^2 g_{\alpha\beta}(R) dR. \quad (9)$$

Az egész mintára (igen nagy, de véges  $R_0$ -ig) integrálva az  $\alpha$  típusú körüli valamennyi  $\beta$  részecske számát kapjuk:

$$N_\beta = \int_0^{R_0} D_{\alpha\beta}(R) dR = \varrho_\beta \int_0^{R_0} 4\pi R^2 g_{\alpha\beta}(R) dR. \quad (10)$$

Végezetül *részecskesűrűség-eloszlási* függvénynek nevezzük a

$$\varrho_{\alpha\beta}(R) = \varrho_{\beta} g_{\alpha\beta}(R) \quad (11)$$

függvényt. Megjegyzendő, hogy míg a párkorrrelációs függvények szimmetrikusak  $\alpha$  és  $\beta$  indexekben, azaz

$$g_{\alpha\beta}(R) \equiv g_{\beta\alpha}(R) \quad (12)$$

és  $R \rightarrow \infty$  határátmenetnél  $g_{\alpha\beta}(R) \rightarrow 1$ , a megfelelő  $D_{\alpha\beta}(R)$  és  $\varrho_{\alpha\beta}(R)$  függvények már nem szimmetrikusak, és a megfelelő határátmenetek:

$$\varrho_{\alpha\beta}(R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \varrho_{\beta} \quad \text{ill.} \quad D_{\alpha\beta}(R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 4\pi R^2 \varrho_{\beta}.$$

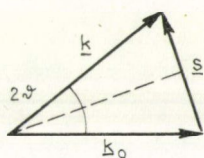
## 1.2. A többkomponensű folyadékok röntgenszórásának leírása

Ebben a pontban a többkomponensű folyadékok részecskéin szóródó röntgen-sugarak intenzitását mint az  $s$  szórási változó függvényét fejezem ki. A diffrakció jelenségét számos munka tárgyalja [11], [38], [44], a feladat a továbbiakban ismertető közelítések mellett, elméleti szempontból megoldottnak tekinthető. Az alapvető összefüggésekre ezért csupán hivatkozni fogok, a részletes levezetés mellőzésevel.

Az  $s$  szórási változó a beeső és a szórt sugarak hullámszám vektora különbségének abszolút értéke,

$$s = |\mathbf{s}| = |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| = \frac{k\pi}{\lambda} \sin \vartheta,$$

ahol  $\vartheta$  a szórási szög,  $\lambda$  a sugár hullámhossza. Koherens szórás esetén  $\lambda$  változatlan,  $s$  a szórási szög monoton függvénye a  $0 \leq \vartheta \leq 90^\circ$  tartományban.



$$|\mathbf{k}_0| = |\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$s = |\mathbf{s}| = 2 |\mathbf{k}| \sin \frac{2\vartheta}{2} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \vartheta$$

2. ábra. A szórási változó definíciója

Az oldat részecskéit független szórócentrumoknak tekintve, az eredő szórt hullám amplitúdója az egyes centrumokon szóródott hullámok szuperpozíciójából adódik:

$$A = \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} f_{\alpha}(s) e^{-i(\mathbf{R}_{i\alpha}, \mathbf{s})}. \quad (14)$$

Ebben az összefüggésben  $f_{\alpha}(s)$  az  $\alpha$  típusú részecske szórási amplitúdója, az a függvény, amely az adott szórócentrum „szóróképességét” jellemzi. Kiszámítása az  $\alpha$  típusú részecske elektronsűrűség-eloszlásának Fourier-transzformációjával történhet, ez utóbbi pedig a részecskék kvantummechanikai vagy statisztikus fizikai le-



írásával számítható. Ha az elektronsűrűség-eloszlás jó közelítéssel gömbszimmetrikus, a szórási amplitúdó csak az  $s$  vektor abszolút értékétől függő, monoton csökkenő függvény lesz, amely az  $s \rightarrow 0$  esetben az elektronszámhoz,  $s \rightarrow \infty$  esetben 0-hoz tart.

$\mathbf{R}_{i\alpha}$  az  $i$ -edik  $\alpha$  típusú részecske helyvektorát jelöli. Az összegezésnél az azonos típusú tagok szórási amplitúdóit csak az  $\alpha$  indexszel láttam el.

A koherens szórt sugarak összintenzitása

$$I = A \cdot A^* = \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \sum_{j=1}^{N_{\beta}} f_{\alpha}(s) f_{\beta}(s) e^{-i(\mathbf{R}_{i\alpha} - \mathbf{R}_{j\beta}, s)}. \quad (15)$$

Itt  $*$  a komplex konjugálás jele.

A (15) kifejezés két részre bontható:

$$I = \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} f_{\alpha}^2(s) + \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \sum_{j=1}^{N_{\beta}} f_{\alpha}(s) f_{\beta}(s) e^{-i(\mathbf{R}_{i\alpha} - \mathbf{R}_{j\beta}, s)} \quad (16)$$

azzal a megjegyzéssel, hogy a második tagban már nem szerepelhet olyan  $i=j$  választás, amelyre az  $\mathbf{R}_{i\alpha} - \mathbf{R}_{j\beta} = \mathbf{0}$ . Az így leválasztott első tag a részecskék saját szórása. A második tag értelmezéséhez nagyon fontos annak feltételezése, hogy oldatainkban nincsenek kitüntetett orientációk, azaz egy adott  $\{\alpha, \beta\}$  pár járulékában a különböző  $\{i, j\}$  indexpárokkal jellemezhető részecskéket összekötő  $\mathbf{R}_{i\alpha} - \mathbf{R}_{j\beta}$  vektorok egyenlő gyakorisággal veszik fel a tér valamennyi irányát. Az összes részecskére való átlagolás  $s$  teljes térre történő átlagolást jelenti, és a részecsképárok eloszlására használhatjuk az 1.1. pontban definiált, szögtől független párkorrelációs függvényeket, mint a folytonos  $r$  változó függvényét. Az átlagolás után nyert kifejezés:

$$\overline{I(s)} = \sum_{\alpha=1}^{\mu} N_{\alpha} f_{\alpha}^2(s) + \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} N_{\alpha} N_{\beta} f_{\alpha} f_{\beta} \frac{1}{V} \int_0^{R_0} 4\pi r^2 g_{\alpha\beta}(r) \frac{\sin sr}{sr} dr \quad (17)$$

$N$ -nel osztva, és felhasználva a definíciókat,

$$\frac{\overline{I(s)}}{N} = \sum_{\alpha=1}^{\mu} x_{\alpha} f_{\alpha}^2 + \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} x_{\alpha} \varrho_{\beta} f_{\alpha} f_{\beta} \int_0^{R_0} 4\pi r^2 g_{\alpha\beta}(r) \frac{\sin sr}{sr} dr. \quad (18)$$

Az  $\overline{I(s)}/N$  mennyiség ily módon egy részecskére vonatkoztatott intenzitás-értéket definiál. Az integrál azonban nem konvergens. Konvergenssé tehető a következő átalakítással:

$$\begin{aligned} \frac{\overline{I(s)}}{N} &= \sum_{\alpha=1}^{\mu} x_{\alpha} f_{\alpha}^2 + \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} x_{\alpha} x_{\beta} f_{\alpha} f_{\beta} \varrho_0 \int_0^{R_0} 4\pi r^2 [g_{\alpha\beta}(r) - 1] \frac{\sin sr}{sr} dr + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} x_{\alpha} x_{\beta} f_{\alpha} f_{\beta} \varrho_0 \int_0^{R_0} 4\pi r^2 \frac{\sin sr}{sr} dr. \end{aligned} \quad (19)$$

Így a második tag már konvergens, a harmadik tagról pedig belátható, hogy az intenzitásban olyan kicsiny  $s$  értékhez adja abszolút értékben jelentős, de  $s$  növekedtével igen gyorsan lecsengő járulékát, hogy az az alkalmazott nagyszögű mérési technikával gyakorlatilag nem választható külön a primer sugártól. A harmadik

tagot így módon elhagyva, a folyadék szerkezetétől függő ún. *redukált intenzitás* kifejezése:

$$si(s) = s \left( \frac{\overline{I(s)}}{N} - \sum_{\alpha=1}^{\mu} x_{\alpha} f_{\alpha}^2 \right) = 4\pi \varrho_0 \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} x_{\alpha} x_{\beta} f_{\alpha} f_{\beta} \int_0^{R_0} r^2 [g_{\alpha\beta}(r) - 1] \frac{\sin sr}{r} dr. \quad (20)$$

Igen fontos azt megjegyezni, hogy a fenti kifejezés dimenzióját tekintve a szórási amplitúdók, végső soron tehát az elektronszám négyzetével arányos. Az így nyert függvény  $s$  növekedtével gyorsan lecsengő függvény. Ha egy önkényesen, praktikus módon megválasztott „módosító”, vagy „élesítő” függvénnyel (20)-t leosztjuk,

a részletek élesebben előtűnnek. Választhatjuk osztónak pl. a  $\sum_{\alpha=1}^{\mu} x_{\alpha} f_{\alpha}^2$  mennyiséget, így az atomi koherens szórásra vonatkoztatott, ún. „atomos” redukált intenzitást nyerjük. Szemléletes fizikai jelentéssel ugyan nem bír, de matematikai egyszerűsítések céljából célszerű olyan osztót választani, ahol az egyes  $\{\alpha, \beta\}$  típusok „súlyainak” összege 1-et ad. Ezt a követelményt teljesíti a  $\left( \sum_{\alpha=1}^{\mu} x_{\alpha} f_{\alpha} \right)^2$  mennyiség, ekkor ugyanis a súlyok összege:

$$\sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} w_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} \frac{x_{\alpha} x_{\beta} f_{\alpha} f_{\beta}}{\left( \sum_{\gamma=1}^{\mu} x_{\gamma} f_{\gamma} \right)^2} \equiv 1.$$

A továbbiakban ez utóbbit használjuk osztónak, így a *módosított redukált intenzitás* definíciója:

$$si(s)M(s) = \frac{si(s)}{\left( \sum_{\alpha=1}^{\mu} x_{\alpha} f_{\alpha} \right)^2} = 4\pi \varrho_0 \Sigma \Sigma \frac{x_{\alpha} x_{\beta} f_{\alpha} f_{\beta}}{\left( \sum_{\alpha=1}^{\mu} x_{\alpha} f_{\alpha} \right)^2} \int_0^{R_0} r^2 [g_{\alpha\beta}(r) - 1] \frac{\sin sr}{r} dr. \quad (21)$$

### 1.3. Az oldatok szerkezete, a röntgendiffrakciós módszerrel nyerhető információk

Az elektrolit oldatok szerkezetét az oldat egyes részecskéi között fellépő fizikai kölcsönhatások alakítják ki. Döntő szerepe van a disszociált ionok Coulomb-terének, a tiszta oldószer szerkezetét kialakító kölcsönhatásoknak (például a vízmolekulák között létrejövő hidrogén-kötéseknek), a van der Waals-erőknek stb. Ha ismernénk a részecske-pár potenciálokat, ki tudnánk számítani a részecskék eloszlásfüggvényeit, amelyek a folyadékszerkezet leírásának alapjául szolgálnak. A pár potenciálok mérésére közvetlen lehetőség nincs, a röntgendiffrakciós mérés alapján azonban számos információ nyerhető az oldatok szerkezetéről.

Az oldatban a részecskék elrendeződése nem statikus, térben és időben folyamatosan változó. A diffrakciós kísérlet alapján meghatározott szerkezet értelmezéséhez meg kell különböztetnünk kétféle szerkezeti fogalmat. Eisenberg és Kauzman elnevezését használva [8] beszélhetünk ún.  $V$  szerkezeetről („vibrationally averaged”) és  $D$  szerkezeetről („diffusionally averaged”). Az első az egyes részecskék körüli lokális szerkezetek időbeli átlagértéke elég kicsiny, de a részecskék rezgésidejét meghaladó időtartamra véve. Az így definiált szerkezetekben azonban a részecskék még



transzlációt végeznek, kicserélődnek, a szerkezetek egymásba átalakulnak. A  $D$  szerkezet ezek időbeli átlaga, elég hosszú időtartamra. Ez utóbbi úgy is definiálható, mint a különböző, de egyidőben jelenlevő  $V$  szerkezetek térbeli átlagértéke. A röntgendiffrakciós kísérlet erről az utóbbiról nyújt információt.

Szerkezeti paramétereink lényeges tulajdonsága tehát, hogy az oldat részecskéinek időbeli és térbeli átlagos eloszlását jellemzik, és a hozzájuk fűzött geometriai kép is csak ilyen értelemben helyes. Nagyon fontos hangsúlyozni, hogy a részecskék közötti kölcsönhatásokra csak közvetve következtethetünk. Így pl. egy adott ion körüli koordinációs szám pusztán a körülötte a térben geometriailag elhelyezkedő vízmolekulák átlagos számát adja meg, függetlenül attól, hogy ez az érték magyarázható-e más mérésekből megállapítható hidratációs energiákkal, vagy sem.

Jelölje  $f^E(r)$  a (21) egyenletben definiált mért redukált intenzitás Fourier-transzformáltját:

$$f^E(r) = \int_0^{s_{\max}} s i^E(s) M(s) \sin sr ds, \quad (22)$$

ahol  $s_{\max}$  a mérés során elért legnagyobb  $s$  érték, az  $E$  index pedig a kísérleti eredetre utal. Az  $f^E(r)$  függvényből számítható a kísérleti radiális eloszlási függvény,  $D^E(r)$ , valamint a kísérleti párkorrelációs függvény,  $g^E(r)$ :

$$D^E(r) = \frac{2r}{\pi} f^E(r) + 4\pi r^2 \varrho_0, \quad (23)$$

$$g^E(r) = \frac{D^E(r)}{4\pi r^2 \varrho_0}. \quad (24)$$

E függvények maximumhelyeiből elvileg az oldatban levő részecskék közötti átlagos távolságok, a maximumok szélességéből e távolságok várható értéke körüli ingadozás mértéke (a rezgési amplitúdók), a  $D^E(r)$  görbe maximumai alatti területekből pedig a központinak képzelt részecske körül az adott gömbhájban elhelyezkedő részecskék átlagos száma (koordinációs szám) állapítható meg. Ezek az értékek azonban keverve tartalmazzák az egyes páreloszlásokra vonatkozó információkat, ezért a szerkezetanalízis feladata az, hogy a fenti teljes kísérleti eloszlásokból az egyes páreloszlásfüggvények járulékait megállapítsuk.

Felírhatjuk tehát:

$$D^E(r) = \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} u_{\alpha\beta}(r) D_{\alpha\beta}(r), \quad (25)$$

és

$$g^E(r) = \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} v_{\alpha\beta}(r) g_{\alpha\beta}(r)$$

a kísérleti eloszlásfüggvények az egyes pár-eloszlásfüggvények szuperpozíciójából adódnak. Az egyes párokra jellemző  $u_{\alpha\beta}(r)$ ,  $v_{\alpha\beta}(r)$  függvények matematikailag bizonyos feltevések mellett sok esetben könnyen felírhatók ugyan, az egyenletek megfordítása azonban elvileg sem lehetséges. Ha pl. a  $g^E(r)$  függvény mellett ismernénk még  $2\mu - 1$  számú különböző mérési módszerrel (pl. neutron vagy elektron-diffrakciós kísérletekből) meghatározott kísérleti függvényt — a megfelelő  $v_{\alpha\beta}(r)$

súlyokkal együtt — a  $g_{\alpha\beta}(r)$  járulékok szeparálása megoldhatóvá válna. Ez bizonyos egyszerűbb rendszerekre (víz, [22]) már sikerült, elektrolit oldatokra még nem. A feladat megoldásához azért közelítő feltevésekre, a görbék tulajdonságainak kihasználására (csak egyes pár-kölcsönhatásra jellemző maximumok keresése), modellépítésre, sorozatmérések egyes tagjainak összevetésére és esetenként kínálkozó egyéb módszerekre van szükség. Ez a tény természetesen növeli a szerkezetről alkotott ismereteink bizonytalanságát, ugyanakkor indokoltta teszi a már mért oldatok újramérését, és az újabb kiértékelési lehetőségek kutatását.

#### 1.4. A radiális eloszlások analízisének néhány problémája

A kísérletekből származtatott eloszlások ( $f^E(r)$ ,  $g^E(r)$ ,  $D^E(r)$  függvények) analízise néhány olyan elvi és gyakorlati problémát vet fel, amelyek növelik a szerkezeti paraméterek meghatározásának bizonytalanságát.

A (21) és (22) egyenletet összevetve láthatjuk, hogy a kísérleti redukált intenzitás és a radiális eloszlások közötti szinuszos Fourier-transzformáció, ill. annak inverze létesít kapcsolatot. Szimbolikus jelöléssel felírva pl.  $g_{\alpha\beta}(r)$  függvényekre:

$$si(s)M(s) = \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} w_{\alpha\beta}(s) \mathcal{F}[g_{\alpha\beta}(r)],$$

$$g^E(r) = \mathcal{F}^{-1}[si(s)M(s)]. \quad (26)$$

A közvetlen megfordítást azonban nehezítik az egyes  $\{\alpha, \beta\}$  párok intenzitás-járulékainak  $w_{\alpha\beta}(s)$  súlyfüggvényei. Az inverz Fourier-transzformáció elvégzését ugyanis a  $w_{\alpha\beta} \mathcal{F}[g_{\alpha\beta}(r)]$  függvényszorzatokon kell végrehajtani, és  $w_{\alpha\beta}$   $s$ -függő lévén, nem vihető ki az  $\mathcal{F}^{-1}$  operátor elé. A Fourier-transzformáció elmélete szerint [33] a szorzatfüggvény transzformáltja a két függvény transzformáltjának konvolúciója lesz [34]:

$$g^E(r) = \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} (\mathcal{F}^{-1}[w_{\alpha\beta}(s)] * \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[g_{\alpha\beta}(r)]]) =$$

$$= \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} (\mathcal{F}^{-1}[w_{\alpha\beta}(s)] * g_{\alpha\beta}(r)) = \sum_{\alpha=1}^{\mu} \sum_{\beta=1}^{\mu} (T_{\alpha\beta}(r) * g_{\alpha\beta}(r)). \quad (27)$$

A konvolúciós integrál definíciója szerint:

$$a(x) * b(x) = \int_{-\infty}^{\infty} a(x) b(t-x) dt.$$

Ebből látható, hogy a (25)-ben felírt  $v_{\alpha\beta}(r)$  szorzó súlyfüggvények helyett valójában olyan függvények lépnek fel, amelyek a  $g_{\alpha\beta}(r)$  függvények súlyozása mellett azokat mintegy „szétkenik” az  $r$  változó tartományában. Ez a maximumok kiszélesedéséhez és a csúcsok eltolódásához, tehát valamennyi szerkezeti paraméter torzulásához vezet.



A dekonvolúció elvileg végrehajtható ugyan, numerikus számítógépes eljárással [7], de ebben a kettős összegzés ismét akadály, mert az egyes tagok szeparálása nélkül a páronként különböző konvolúciós hatások nem ismerhetők fel.

A  $T_{\alpha\beta}(r)$  függvény számára elméletileg a Dirac-féle  $\delta$ -disztribúció az egyetlen lehetséges alak, amely a konvolúciós elkenést nem váltja ki. Könnyen kimutatható azonban, hogy ez egyértelmű a  $w_{\alpha\beta}(s) = \text{konstans}$  feltétellel, ami eleve nem teljesül.

A röntgendiffrakciós gyakorlatban ezt az ún. *konvolúciós problémát* általában úgy kerülük meg, hogy  $w_{\alpha\beta}^* = \text{konstans}$  közelítő súlyokat vezetnek be. Ennek egy lehetséges módja az ún. effektív szórási amplitúdók ( $f^*(s)$ ) és effektív elektron-számok ( $Z_\alpha^*$ ) bevezetése, pl. a következő definícióval: [43]

$$f_\alpha(s) \approx Z_\alpha^* \cdot f^*(s), \quad (28)$$

ahol

$$f^*(s) = \frac{\sum_{\alpha=1}^{\mu} f_\alpha(s)}{\sum_{\alpha=1}^{\mu} Z_\alpha^*} \quad (29)$$

valamint

$$Z_\alpha^* = \frac{1}{s_{\max}} \int_0^{s_{\max}} f_\alpha(s) ds. \quad (30)$$

Ekkor

$$w_{\alpha\beta}(s) = \frac{x_\alpha f_\alpha f_\beta x_\beta}{\left(\sum_{\gamma=1}^{\mu} x_\gamma f_\gamma\right)^2} \approx \frac{Z_\alpha^* Z_\beta^* (f^*)^2 \cdot x_\alpha x_\beta}{\left(\sum_{\gamma=1}^{\mu} x_\gamma Z_\gamma^* f^*\right)^2} = \frac{x_\alpha x_\beta Z_\alpha^* Z_\beta^*}{(\sum x_\gamma Z_\gamma^*)^2} = w_{\alpha\beta}^* = \text{konst.}$$

Az új súlyokban a szórási amplitúdók  $s$ -tartományokra képezett átlaga szerepel. A 3. ábrán a 2 mólos LiCl és a 4 mólos CsCl példáján szemléltetem az átlagolás hatását. A paraméterek értékében elkövetett hiba számszerűen nehezen adható meg, mivel az oldat komponenseinek viselkedésétől erősen függ. A nagy szóróképeségű részecskéket tartalmazó anyagokban a relatív hiba nyilván nagyobb.

A konvolúciós probléma egy lehetséges analitikus tárgyalását ismerttettem a X. Nemzetközi Krisztallográfiai Kongresszuson, a 2 mólos LiCl és 4 mólos CsCl példáján [36]. A  $w_{\alpha\beta}(s)$  függvényeket

$$w_{\alpha\beta}(s) = \sum_{k=1}^3 A_{\alpha\beta}^{(k)} e^{-B_{\alpha\beta}^{(k)} s^2} \quad (31)$$

alakú, 6 paraméteres függvényekkel közelítettem meg. A paramétereket úgy választottam meg a legkisebb négyzetes illesztési módszerrel, hogy a súlyfüggvények igen jó analitikus leírását adták. A  $g_{\alpha\beta}(r)$  függvények modellezésére a következő, lényegében Gauss-függvényeket tartalmazó alakot választottam:

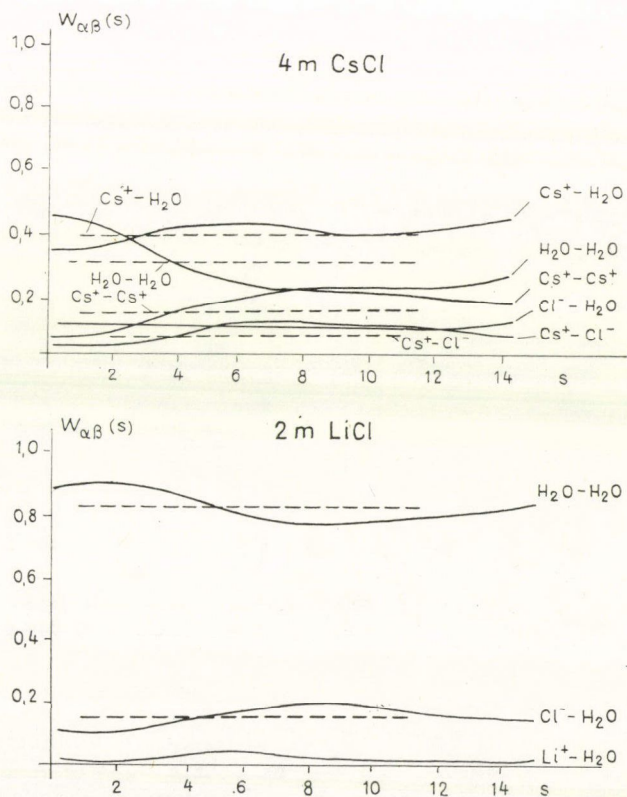
$$g_{\alpha\beta}(r) = \frac{1}{4\pi Q_0} \sum_{j=1}^J \frac{c_{\alpha\beta}^{(j)}}{\sqrt{2\pi} l_{\alpha\beta}^{(j)} r_{\alpha\beta}^{(j)}} \left[ e^{-\frac{(r-r_{\alpha\beta}^{(j)})^2}{2(l_{\alpha\beta}^{(j)})^2}} - e^{-\frac{(r+r_{\alpha\beta}^{(j)})^2}{2(l_{\alpha\beta}^{(j)})^2}} \right]. \quad (32)$$

Itt  $J$  a figyelembe vett maximumhelyek száma,  $c_{\alpha\beta}^{(j)}$ ,  $r_{\alpha\beta}^{(j)}$  és  $I_{\alpha\beta}^{(j)}$  a  $j$ -edik maximum-hoz rendelt koordinációs szám, távolság, ill. rezgési amplitúdó. Ez a függvény a Debye által levezetett, az intenzitás (21) kifejezésében az integrál értékének megfelelő

$$\frac{\sin sr_{\alpha\beta}^{(j)}}{r_{\alpha\beta}^{(j)}} e^{-\frac{I_{\alpha\beta}^{(j)2}}{2}s^2}$$

alakú függvények Fourier-transzformáltjaiból áll. Az így választott alakok lehetővé tették a konvolúciós integrál analitikus kiszámítását, és ezzel a paraméterek hibájának becslését. Példáinkban a csúcsok eltolódása 0,1 Å-nél kisebb érték volt, ami 1—5% relatív hibát jelent. A rezgési amplitúdók változása azonban jóval nagyobb. Számértékben 0,1—0,2 Å-nek bizonyult, ami akár 50—100% relatív hibát is jelenthet! A koordinációs számok „zavaró” szorzótényezőjük ismeretében pontosan számíthatók voltak. Ez a szorzószám más (közelítő) módszerek esetében azonban nem pontosan ismert, és teljes egészében tartalmazza a közelítés hibáját, pl. a (28)—(30) alkalmazásával járó hibát.

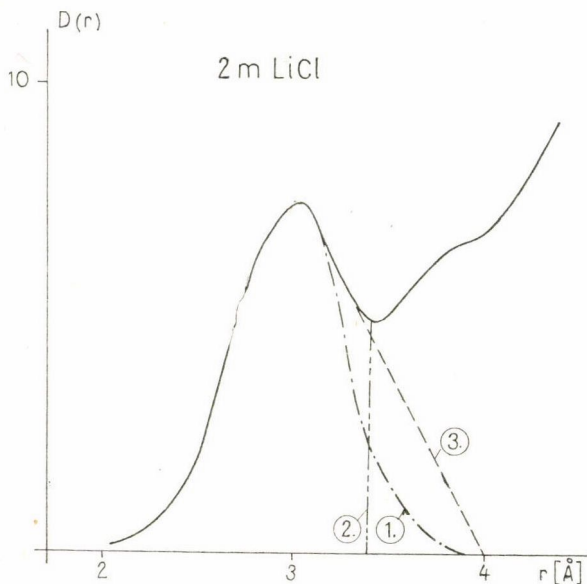
Egy másik zavaró tényező a kiértékelésben az, hogy a  $g(r)$  és  $D(r)$  függvények egy  $r^2$ -tal arányos szorzóban különböznek egymástól. Ez azt eredményezi, hogy



3. ábra. A jelentősebb járulékok súlyfüggvényei és az átlagsúlyok



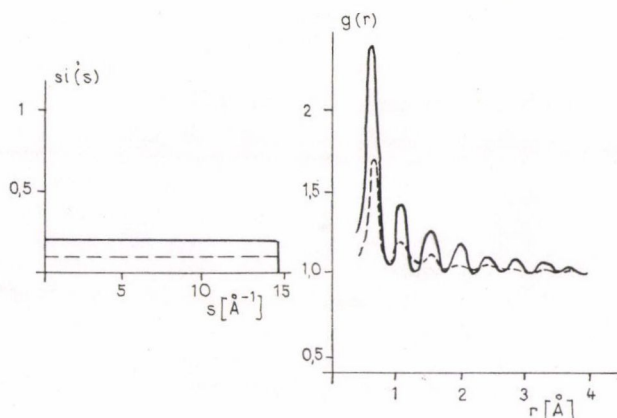
a  $D(r)$  függvény szélsőérték-helyei a nagyobb  $r$  értékek felé tolódnak el  $g(r)$ -beli megfelelőjükhöz képest. Ez ismét bizonytalanságot okoz a „valódi” távolságértékek megállapításában. Ezenkívül az egyes csúcsok aszimmetrikusak, és már kis átfedés esetén is bizonytalanná teszik az alattuk levő terület mérését, a koordinációs számok értékeit. Az irodalomban gyakori a vita arról, hogy ilyenkor hogyan indokolt a terület nagyságát megállapítani. Néhány lehetőséget szemléltet a 4. ábra. A több járulékot egybefogó főmaximum alatti területből csak átlagos koordinációs szám állapítható meg, és ez az érték is erősen függ a területmérés módjától.



4. ábra. A csúcs alatti terület definíciójának hatása a koordinációs számra

A szerkezeti információkat hordozó „valódi” hullámok mellett a radiális eloszlásokon mindig megjelennek zavaró *álhullámok* is. Ezek felismerése és csökkentése döntő fontosságú. Álhullámok jelentkezhetnek a mért intenzitás statisztikus mérési hibája folytán, a redukált intenzításra ülő nagy periódusú álhullám, trendhiba következtében, valamint az ún. levágási hiba (cut off) miatt. Ez utóbbi annak következménye, hogy a mérés és a numerikus Fourier-transzformáció mindig csak egy véges  $s_{\max}$  értékig történik, így az elméletileg végtelen hullámok csonkolódnak. Ha ráadásul az utolsó mérési pontban az intenzitásnak nem zérus helye van, a transzformáció hatása olyan lesz, mintha egy „lépcsős függvény” ült volna a mérésre (5. ábra).

Az álhullámok indokolt mértékű simítással, az integrál felső határának célszerű megválasztásával csökkenthetők. A simításra, azaz a statisztikus szórásból adódó „nagyfrekvenciás zaj” levágására az ún. spline-függvények módszerét használjuk [37]. További lehetőséget jelent az a plauzibilis követelmény, hogy a  $D(r)$  függvények



5. ábra. A levágási hiba illusztrálása:  
két lépcsős függvény transzformáltja

értéke legyen nulla az olyan kis  $r$  tartományban, ahol még fizikailag reális részecske-távolságok nem lehetnek. Így az álhullámok egy része kitörölhető, és ismételt Fourier- és inverz-transzformációkkal hatásuk mind a redukált intenzitásban, mind a radiális eloszlásokban jelentősen csökkenthető.

Az itt ismertetett problémák ellenére a radiális eloszlások analízise döntő jelentőségű a szerkezet meghatározásában. Szemléletes fizikai jelentésüknél fogva használatuk különösen előnyös. A bizonytalanságok csökkentése érdekében azonban az intenzitások és a radiális eloszlások párhuzamos kiértékelése vezet célra.

## 2. Az alkáli kloridok vizes oldatainak szerkezeti problémái

### 2.1. Irodalmi előzmények

Az alkáli klorid és más halogenid oldatok szerkezetét a folyadék-röntgen-diffrakciós kutatások történetében már több alkalommal, számos kutató vizsgálta. Csupán az utóbbi évtizedben, a legmodernebb kísérleti és interpretációs módszerekkel végzett vizsgálatokra szorítkozva, két amerikai [23], [29], három olasz [5], [25], [26], két szovjet [41], [42] és egy holland [3] munkára hivatkozhatunk. Valamennyi dolgozat tartalmaz említésre méltó eredményeket, ugyanakkor lényeges különbségek vannak a kérdések felvetésében, és a szerkezetanalízis módszereiben egyaránt.

A nagy érdeklődés érthetővé válik, ha figyelembe vesszük az oldatok egyszerű összetételét. A vízben, mint oldószeren kívül két egyértékű ion van bennük, amelyek kémiai szempontból a legszélsőségesebben viselkednek. Valamennyi független gömb-szimmetrikus szórócentrumnak tekinthető. Ionpárok képződése nem nagyon várható (a CsCl esetében ez némileg vitatott). Nagy segítséget jelent, hogy más fizikai mérési módszerekkel már számos adatot nyertek korábban az ionok környezetére vonatkozóan. Elég sok, bár gyakran ellentmondó információ áll rendelkezésünkre az alkáli ionok hidratációjának mértékére termokémiai, NMR, dielektromos állandó



mérésekből, ill. az ezeket magyarázó elméleti munkákból 2 [4], [21], [28]. A kristályban és olvadékokban levő megfelelő ionok rádiuszai szintén ismeretesek [39]. A kiértékeléshez szükséges szórási amplitúdók számításával, analitikus leírásukkal is számos munka foglalkozott [6], [10], [12], [13], [32].

A szembeötlően kínálkozó előnyök ellenére a szerkezetanalízis olyan problémákat vet fel, amelyek megoldása a számos elvégzett vizsgálat ellenére sem tekinthető megnyugtatónak.

A radiális eloszlások analizisével kapcsolatos, az 1.4. pontban említett nehézségek valamennyi oldatnál jelentkeznek. Az egyes részecskepárok eloszlásfüggvényei csak igen durva közelítésekkel választhatók el egymástól. A 2,5—3,5 Å-ig terjedő tartományban minden esetben egy nagy, több járulékból összeolvadt főmaximum található. Ennek alakja, csúcsának helye a kation és anion minőségétől, valamint koncentrációjuktól függően változik. Különösen bonyolult a kérdés a CsCl oldatoknál, ahol a  $\text{Cs}^+ - \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Cl}^- - \text{H}_2\text{O}$  első szomszéd járulékok, valamint (ha van értelme ilyenről beszélni) a közvetlen kontaktusban levő ion-ion párok járuléka mind ide esnek. Ráadásul minden korábbi szerző az alkalmazott közelítő módszer eredményességének szempontjából választotta meg vizsgálati anyagait, így a különböző oldatok szerkezeti paramétereinek közötti összefüggésekre nem derülhetett fény.

Az irodalmi előzmények sorában alapvető fontosságú Lawrence és Kruh 1966-os munkája [24], ők  $\text{Li}^+$  és  $\text{Cs}^+$  kationok mellett  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Dr}^-$  és  $\text{I}^-$  anionokat tartalmazó, különböző töménységű oldatokat választottak. Mérési koncepciójuk az volt, hogy az egyes radiális eloszlási függvényeket megfelelő szorzóval kivonva egymásból, az egyes kölcsönhatások járuléka elkülöníthetők. Az analízis során a következő feltevésekkel éltek:

i) A hígítás növekedtével a maradék víz szerkezete azaz a hidratburkon kívüli vízmolekulák közötti kölcsönhatás egyre jobban hasonlít a tiszta víz szerkezetéhez,

ii) a töménység növekedtével a maradék víz szerkezete egyre jobban szétesik, határesetben a szerkezet nélküli kontinuumnak felel meg,

iii) a  $\text{Li}^+$  ionok szóróképesége olyan kicsiny, hogy oldataikban a kation-víz kölcsönhatás járuléka elhanyagolható. Az i) feltevés alapján a leghígabb  $\text{Li}^+$  tartalmú oldat radiális eloszlási függvényéből a víz REF-ét megfelelő módon kivonva, a különbséggörbéből az anion körüli koordinációs számra egy alsó becslést adtak meg, az ii) feltevés alapján pedig a legtöményebb oldat REF-ének használatával egy felső becslést. Hasonló töménységű,  $\text{Cs}^+$ -ot, ill.  $\text{Li}^+$ -ot tartalmazó oldatok REF-ének kivonása a  $\text{Cs}^+$  kation hidratációs számára adott becslést. A közölt koordinációs számok ezért igen bizonytalanok.  $\text{Cl}^-$  ionra pl. 6,2 és 11,0 között a 2,5 m LiCl, 5,4 és 8,7 között, az 5 m LiCl, 6,5 és 7,3 között LiCl esetében,  $\text{Cs}^+$  ionra 2,9 és 6,2 között a 2,5 m CsCl oldatban stb. Az első szomszédok távolságait a különbségi REF-ek maximumainak közvetlen leolvasásával nyerték, rezgési amplitúdókat nem becsültek. A koordinációs számok kiszámításakor, még az effektív elektronszámoknál is durvább közelítéssel, az egyszerű elektronszámokat használták.

Lényegében hasonló koncepció alapján, megfelelő REF-ek kivonásával dolgozott van Beurten is 1975-ben [3]. A  $\text{Cl}^-$  körüli hidratációs számra  $\text{NH}_4\text{Cl}$  oldat méréséből következtetett,  $7 \pm 1$ -re becsülve értékét. A  $\text{Cl}^- - \text{H}_2\text{O}$  távolságot 3,25 Å-nek mérte.  $\text{Cl}^-$  anion mellett a  $\text{Na}^+$  ion hidratációs-számát  $4,5 \pm 0,5$ -re, a  $\text{K}^+$ -ét pedig  $5 \pm 0,5$ -re adta meg. Koncentrációfüggést nem vizsgált. A távolságértékeket



a különbségfüggvényekről olvasta le és a maximumok szélességéből 0,15 Å-os amplitúdókra következtetett.

Tyerehova és társai 1969-ben két rövid közleményben számoltak be  $\text{NH}_4\text{Cl}$ ,  $\text{KCl}$ ,  $\text{NH}_4\text{F}$  és  $\text{KF}$  oldaton történt méréseikről [41], [42]. Feltételezték a vízmolekulák körüli koordinációs szám változatlanlanságát, valamint azt, hogy ionrádiuszuk jó egyezése miatt az  $\text{NH}_4^+$ , ill.  $\text{K}^+$  ionok éppen helyettesíteni tudnak egy vízmolekulát. A főmaximum alatti terület értékéből, valamint a tiszta vízre általuk mért 4,5-es koordinációs számból a  $\text{K}^+$  körüli 5,3-as,  $\text{Cl}^-$  körüli 6-os koordinációra következtek. Véleményem szerint ezek a feltevések erős megszorítást jelentenek. A víz-víz kölcsönhatás 4,5-es koordinációs számát, valamint a közölt távolság-értékeket a többi mérésekből nyert adatoknál nagyobbaknak mérték.

Ezeknek a munkáknak közös vonása, hogy fő céljuk az ionokat közvetlenül körülvevő vízmolekulák koordinációs számainak becslése volt, „első koordinációs szféra”, a radiális eloszlási függvénnyel felbontása alapján. A nyert információnak sem mennyisége, sem pontossága nem meggyőző. Bár a használt feltevések fizikailag szemléletesek, szigorúan csak határesetekre vonatkozhatnak, a közepes töménységű (2–10 mólos) oldatok esetében már nem helytállóak. Külön probléma, hogy a közlések pontossága kvantitatíve nem vizsgálható.

Az utóbbi években más jellegű analízis is történt. Ezek közül Narten és társai [29], valamint Licheri, Piccaluga és Pinna mérései [5], [25], [26] emelkednek ki. Narten és amerikai csoportja különböző töménységű  $\text{LiCl}$  oldatokon egyidejűleg röntgendiffrakciós és neutrondiffrakciós mérést is végzett, ami az elektrolitok szerkezetének vizsgálatában úttörő kezdeményezés. A kétféle mérés kombinált kiértékelésével megbízható távolság- és rezgési amplitúdó adatokat nyert. A  $\text{Li}^+$  ionok körüli 4-es, a  $\text{Cl}^-$  ionok körüli 6-os koordinációs szám feltételezésével elvégezték a redukált intenzitás-függvények első szomszéd modellezését. Az így előállított elméleti függvények jól egyeztek a kísérleti görbékkel. Vizsgálatuk nem terjedt ki más oldatokra. A szerkezeti paraméterekben koncentrációfüggést lényegében nem tapasztaltak, a  $\text{Cl}^-$ — $\text{H}_2\text{O}$  távolság enyhe, a  $\text{Li}^+$ — $\text{H}_2\text{O}$  távolság meredekebb csökkenő trendjén kívül. (3,19 Å—3,10 Å, ill. 2,2 Å—1,95 Å értékek a kb. 2 mól—20 mól töménységű tartományban.) A maradék víz szerkezetét változatlannak tekintve, a víz kísérleti redukált intenzitásfüggvényét kivonták az oldatok megfelelő függvényeiből. Ez azonban az esetleges mérési hibák hatását növeli, és koncentrált oldatoknál különösen jogosulatlan feltételezésen alapul.

Az olasz csoport munkáiban  $\text{LiCl}$ ,  $\text{LiBr}$  és  $\text{NaCl}$  oldatok szerepeltek, 1—2 koncentrációban. A radiális eloszlások kvalitatív elemzése alapján úgy találták, hogy a  $\text{Li}^+$ — $\text{H}_2\text{O}$  és a  $\text{Na}^+$ — $\text{H}_2\text{O}$  kölcsönhatás olyan kicsiny, hogy nem kiértékelhető. A maximumok változását a további munkákkal egyező irányúnak találták. Később elvégezték a redukált intenzitásfüggvények első szomszéd modellezését a  $\text{Li}^+$  tartalmú oldatokra, és megerősítették a  $\text{Cl}^-$  körüli 6-os koordinációs szám értékét. Távolság és rezgési amplitúdó adataik lényegében egyeznek az amerikai csoport adataival. Figyelembe vették a szerkezet nélküli kontinuum szórását is, becslést adtak a szerkezet nélküli tartomány kezdetének távolságára is. A maradék víz szerkezetét ők sem vizsgálták.

A korábbi kutatások tehát jelentős mértékben felderítették az alkáli halogenid oldatok szerkezetét, de továbbra is számos nyitott kérdés maradt. A következő pontban ezeket kívánom összefoglalni. Ehhez segítséget nyújt az 1. táblázat, amely a korábbi munkák főbb eredményeit tartalmazza.



## 1. TÁBLÁZAT

*A korábbi vizsgálatok fontosabb eredményei*A  $\text{Cl}^-$ — $\text{H}_2\text{O}$  első szomszéd távolság és a klorid ion hidratációs száma

Oldat	$C_{\text{Cl}^-}$	$r_{\text{Cl}^- \text{H}_2\text{O}}$ (Å)	Hivatkozás
2,5 m—10 m LiCl	5,4—11,0	3,13—3,20	[24]
2 m—5 m LiCl	7,1—10,2	3,10—3,15	[5]
2 m—5 m LiCl	6	3,04—3,19	[26]
2 m—20 m LiCl	6	3,19—3,10	[29]
2 m $\text{NH}_4\text{Cl}$	7	3,25	[3]
2 m KCl	6	3,2	[41]

Kation-víz első szomszéd távolság és a kation hidratációs száma klorid ion mellett

Kation $\text{X}^+$	$r_{\text{X}^+ \text{H}_2\text{O}}$ (Å)	$C_{\text{X}^+}$	Hivatkozás
$\text{Li}^+$	2,04—1,99	4	[25]
$\text{Li}^+$	2,25—2,14	4	[26]
$\text{Li}^+$	2,25—1,95	4	[29]
$\text{Na}^+$	2,4	4,5	[3]
$\text{K}^+$	2,8	5,3	[42]
$\text{K}^+$	2,7	5,5	[3]
$\text{Cs}^+$	3,15	2,9—6,2	[24]

## 2.2. Nyitott kérdések az alkáli halogenid oldatok vizsgálatában

Úgy vélem, az alkáli kloridok vizes oldatainak szerkezetének pontosabb megismerése akkor lehetséges, ha a következő kérdésekre igyekszünk a választ megkeresni:

1. Mi a magyarázata az adatok szórásának? Mennyiben befolyásolják az eltéréseket a kísérleti körülmények és az alkalmazott közelítések? Az eddigi vizsgálatok reflexiós technikával készültek, a szükséges korrekciókat, és az atomi koherens-, ill. Compton-szórás levonását sem egyformán hajtották végre. Mindmáig nem történt meg a különböző laboratóriumokban végzett kísérletek összehasonlíthatóságának igényes vizsgálata. Az interpretációnál felhasznált közelítések különbözők, hatásuk nem pontosan ismert.

2. Mennyi a kationok hidratációs száma, mutat-e rendszámfüggést, koncentrációfüggést? A  $\text{Li}^+$  ionra van a legtöbb mérési adat, általános a 4-es érték. A  $\text{Li}^+$ — $\text{H}_2\text{O}$  kölcsönhatás észlelhetősége azonban igen bizonytalan. A radiális eloszlások analízise igen pontatlan értéket szolgáltat. A kérdésre adott válasz különböző kationokat tartalmazó, különböző koncentrációjú oldatok mérésével remélhető.

3. Mennyi az anion esetünkben klorid hidratáció mértéke, függ-e a jelenlevő kationtól, ill. a koncentrációtól? A vonatkozó irodalomban feltűnő, hogy a  $\text{Cl}^-$  ion koordinációs száma soha nem esik messza 6-tól, még egészen eltérő kationok mellett sem, pl.  $\text{Ca}^{++}$ ,  $\text{Mg}^{++}$ ,  $\text{Cu}^{++}$  kationok mellett is ez az érték adódott [1], [27], [45]. Egy azonos körülmények között végzett sorozatmérés jelentősen megerősítheti, vagy gyengítheti ezt az információt.

4. Hogyan változik a „maradék víz” szerkezete? Erre a kérdésre igényes választ még egyáltalán nem adtak. A maradék víz szerkezetét korábban egyáltalán nem vizsgálták, vagy szélsőséges feltételezéseket tettek (teljes változatlanág, ill. teljes szétesés).

5. Felfedezhetők-e összefüggések az első szomszédok közötti távolságok és rezgési amplitúdók adataiban? A távolságértékek általában a kristályos ion- (atomi) rádiuszok összegének adódnak. Sok szerző ezt a tényt a priori feltevésnek elfogadja. Ez azonban eleve kizárja az esetleges koncentráció- vagy környezetfüggés vizsgálatát.

6. Felismerhető-e a közvetlen szomszédon túli környezet szerkezete? Hogyan jellemezhető ez a szerkezet? A távolabbi szomszédokkal alkotott párok járulékainak elkülönítése még annyira sem remélhető, mint az első szomszédok esetében, a lehetséges párok számának rohamos növekedése folytán. Ezek összegzett hatását teljesen szerkezet nélküli kontinuumnak tekinteni azonban olyan közelítés, amely bizonytalanná teszi a 4–5 Å feletti tartományban a REF-ek interpretációját.

### 3. Az alkalmazott mérési és adatfeldolgozási módszer

#### 3.1. A szórt röntgensugarak intenzitáseloszlásának mérése transzmisszióban

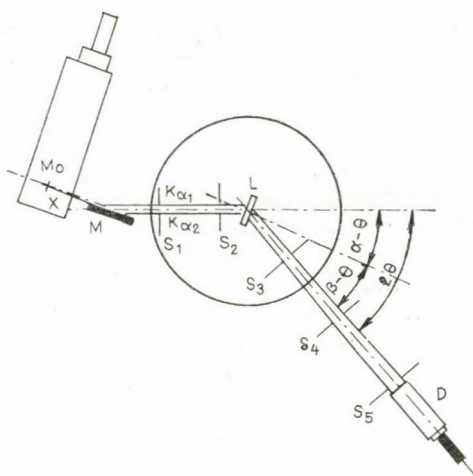
A folyadékok röntgendiffrakciós vizsgálatára alkalmazott mérési módszerek közös elve az, hogy egy alkalmas röntgenerátorból nyert röntgensugarakat a vizsgált mintán szórattva, a szórt sugarak intenzitásának szögeloszlását mérik. A konkrét technikai megvalósításra két fő lehetőség adódik. Az ún. reflexiós elrendezésnél a sugarak a minta vízszintes szabad felszínén és különböző mélységű rétegein szóródnak. Ez a módszer magas hőmérsékleten (olvadékok), ill. nagy abszorpciójú folyadékoknál előnyös, de alkalmazzák elektrolit oldatokra is. Ez utóbbiakra azonban alkalmasabbnak tartjuk az ún. transzmissziós mérési elrendezést, így laboratóriumunkban ezt fejlesztettük ki. Elvi vázlatát a 6. ábra mutatja be.

A Seifert gyártmányú diffraktométeren a generátorból kilépő sugár  $\text{LiF}$  egykristályon történő monokromatizálás után a mintatartóban elhelyezett folyadékon szóródik, míg egy része elnyelődik. A mintatartó túlsó oldalán kilépő sugarak intenzitását szcintillációs számlálóval regisztráljuk. A mintatartó és a detektor függőleges tengely körül forgatható, és előre elkészített program szerint egy-egy mérési pontban a mérés idejére megállítható. Az erre a célra kidolgozott automatikus léptetőberendezés intézeti szabadalom [17].

A transzmissziós mérési elrendezés nagy előnye a reflexiós technikával szemben az, hogy a kis és közepes szögek tartományában, ahol az intenzitás információkban gazdag, nagyobb pontosságot tesz lehetővé. Kis abszorpciójú folyadékok, így a vizes elektrolit oldatok mérésére különösen célszerű, mivel elkerüli a reflexiós technikánál fellépő nagy behatolási mélység okozta problémákat. Az abszorpció mértéke pontosan mérhető, a besugárzott térfogat szögfüggése igen egyszerű, így a szükséges korrekciók könnyen elvégezhetők.

Az alkáli-klorid oldatok méréséhez használt  $\text{Mo}$  anódos röntgensugár karakterisztikus  $K_\alpha$  sugárzása  $\lambda = 0,711$  Å hullámhosszúságú. Ennek megfelelően a rendelkezésünkre álló  $0 \leq 2\theta \leq 113,1^\circ$  szögtartomány  $0 \leq s \leq 14,75 \text{ \AA}^{-1}$  szórásváltozó tartománynak felelt meg. A léptető automatikát úgy programoztuk, hogy az  $s$ -vál-

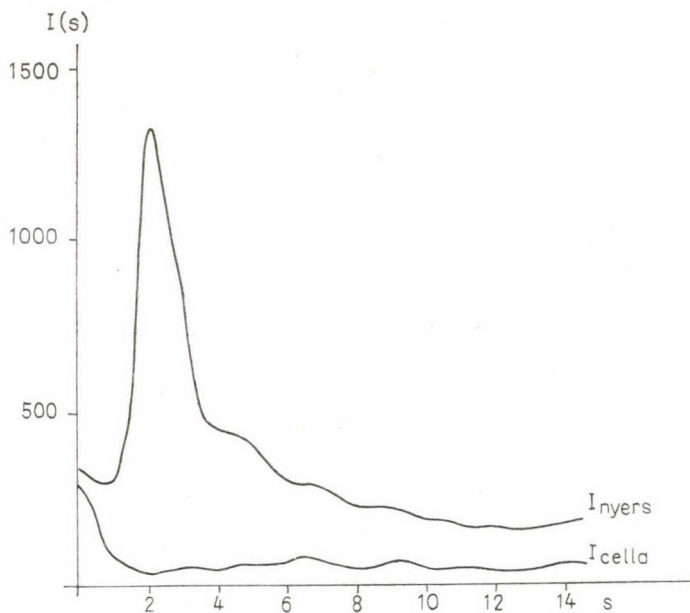




6. ábra. A transzmissziós mérési elrendezés

Jelek:  $X$  = forrás,  $M$  = monokromátor,  
 $S_1$ – $S_5$  = rések,  $L$  = minta,  $D$  = detektor

tozó szerint haladva egyenletes lépésközlőként 5–5 ismételt mérést végezzen, egyenként 20 000 impulzus bevárásával. Az  $s$ -skála lépésközlőjei a  $0 \leq s \leq 5 \text{ \AA}^{-1}$  intervallumban  $s=0,05 \text{ \AA}^{-1}$ , az  $5 \leq s \leq 10 \text{ \AA}^{-1}$  intervallumban  $s=0,1 \text{ \AA}^{-1}$  és a  $10 \leq s \leq 14,75 \text{ \AA}^{-1}$  intervallumban  $s=0,25 \text{ \AA}^{-1}$  értékek voltak.



7. ábra. Nyers intenzitás és az üres cella szórása (2 m LiCl)

A mintatartó rozsdamentes acélból készült, planparallel kvarcablakokkal ellátott, termosztálható küvetta volt. A cellába zárt minta rétegvastagsága kb. 0,14 cm. Az ablakok az elektrolitokkal szemben kémiaiilag ellenálló, kristálytanilag orientálatlan egykristályból készültek, vastagságuk 0,08–0,1 mm. Ezeket úgy helyeztük el, hogy az üres mintatartó szórási képén Bragg-maximumok ne jelentkezzenek. Az üres cella szórását — későbbi levonás céljából — az oldatéhoz hasonló programmal, pontonként 5-ször 2000 impulzus bevárásával mértük meg. A 2 m LiCl oldaton mért „nyers” intenzitást és az üres cella szórását mutatja be a 7. ábra.

Az abszorpció mérése a legyengített primér sugár intenzitás csökkenésének mérésével történt 0°-os szögnél. Az oldattal megtöltött és az üres cella áteresztő képességéből az oldatra és a cellára vonatkoztatott  $\mu d$  szorzat meghatározható:

$$\frac{I_{\text{teli}}}{I_0} = e^{-[(\mu d)_{\text{oldat}} + (\mu d)_{\text{cella}}]},$$

$$\frac{I_{\text{üres}}}{I_0} = e^{-[(\mu d)_{\text{cella}}]},$$
(33)

ahol  $\mu$  a lineáris abszorpciós együttható,  $d$  a rétegvastagság,  $I_0$  pedig a beeső sugár intenzitása. A 2. táblázat az oldatainkra mért értékeket tartalmazza. Az oldatok abszorpciójának változása a kation és a koncentráció függvényében nagyban befolyásolja a mérési időt. Összehasonlításképpen két adat: az előírt mérési program a 2 mólos LiCl oldatnál kb. 6 óra alatt ment végig, a 4 mólos CsCl oldatnál a teljes program mérési ideje több napot, mintegy 70–80 órát igényelt.

Külön megjegyzem, hogy mérési sorozatunkból hiányzik a RbCl oldat. Ennek az oka, hogy a  $\text{Rb}^+$  ionok a kb. 0,7 Å hullámhosszúságú röntgensugaraknak hatására gerjesztődnek, és kb. 0,92 Å hullámhosszú fluoreszcens sugárzást bocsátanak ki. Próbámeréseim alapján ennek intenzitása a szerkezeti információt hordozó nem fluoreszcens járulék 3–5-szöröse. Az elvileg megfelelő Zr–Nb szűrőpár alkalmazása nem járt sikerrel, a fluoreszcens járulék kiszűrése után a jel/zaj viszony olyan rossz lett, hogy az adatfeldolgozás további lépései reménytelenül váltak.

2. TÁBLÁZAT

Az abszorpciómérésből kapott  $\mu d$  értékek

Oldat	$(\mu d)_{\text{oldat}}$
2m LiCl	0,324
4m LiCl	0,394
2m NaCl	0,293
4m NaCl	0,434
2m KCl	0,510
4m KCl	0,723
2m CsCl	1,817
4m CsCl	3,220

### 3.2. Korrekciók, normalizálás és a redukált intenzitások előállítása

Ahhoz, hogy mért függvényeinkből a szerkezetre vonatkozó információkat kiolvashassuk, bizonyos korrekciókat kell alkalmazni, ill. a függvényeket a mérési körülményektől független, „standard” állapotra kell visszazámolni. Az oldatainknál szokásos számítások részletes leírását Hajdu és Pálincás közleménye tartalmazza [16].



A mért nyers intenzitásokból a redukált intenzitásokhoz a következő lépéseken keresztül jutunk el:

(1) Az üres mintatartó szórásának levonása. Ebben a lépésben az oldat abszorpciójának hatását is figyelembe vesszük. A folyadék által szórt sugarak intenzitása így:

$$I_{\text{oldat}} = I_{\text{mért}} - I_{\text{cella}} \cdot \exp \left[ \frac{-(\mu d)_{\text{oldat}}}{\cos \vartheta} \right] \quad (34)$$

az exponenciális tényező az abszorpciómérés adataiból számítható.

(2) Polarizációs korrekció. A polarizálatlannak feltételezett, a monokromátorra beeső röntgensugarak polarizációja a mérés geometriai elrendezésétől függetlenül a következő formulával írható le:

$$P(\vartheta) = \frac{1 + \cos^2 2\alpha \cdot \cos^2 2\vartheta}{1 + \cos^2 2\alpha}, \quad (35)$$

ahol  $\alpha$  a használt (LiF egykristály) monokromátor Bragg-reflexiójának szöge.

(3) A teljes minta abszorpciója. A koherensen szórt sugárzás abszorpcióját egy

$$A(\vartheta) = \frac{1}{\cos \vartheta} e^{\left[ \mu d \left( 1 - \frac{1}{\cos \vartheta} \right) \right]} \quad (36)$$

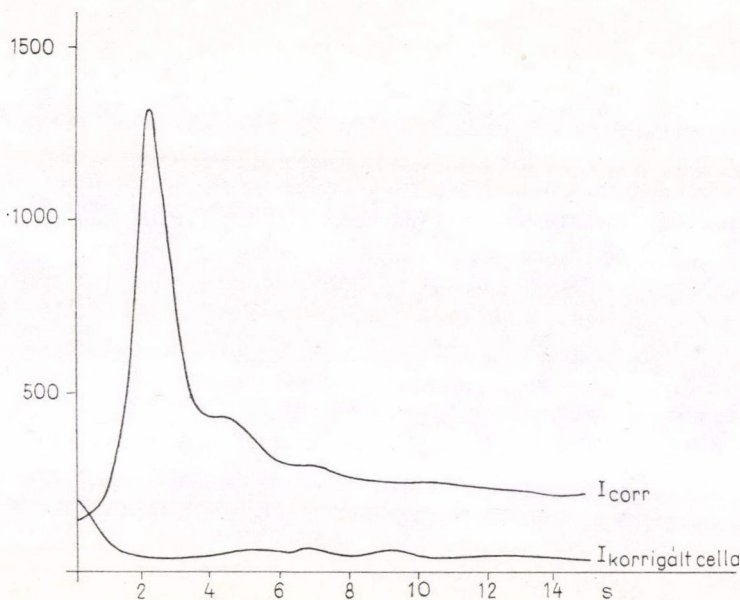
alakú függvény írja le, ahol  $\mu d$  a teljes minta (folyadék + mintatartó) abszorpciós együtthatójának és vastagságának szorzata. (A 3.1. pontban leírt módon mért érték.) A (36) kifejezéssel osztva az oldaton szórt sugarak intenzitását, az eredmény a „gyengített” szórás értékének tekinthető.

(4) A Compton-szórás abszorpciója. A szórt sugárzás koherens része mellett mindig fellépő inkohereensen szórt sugarak hullámhossza a beeső sugárhoz képest eltolódik, ezért abszorpcióját más alakban kell figyelembe venni, mint a koherens sugárzásét. Erre a célra szolgál a Hajdu és Pálinskás említett cikkében [16] közölt módosított abszorpciós tényezővel való osztás. Ez a tényező függ a belépő sugarak hullámhosszától, a minta vastagságától és sűrűségétől, valamint tartalmazza a benne szereplő részecskék abszorpciós együtthatójának számításához szükséges Victoreen-együtthatókat.

Az (1)–(4) lépések elvégzése után nyert függvényeket korrigált intenzitásnak nevezzük ( $I_{\text{corr}}(s)$ ). A fenti korrekciók mértékét vizsgálva, erős  $s$ -függést tapasztalunk. A 7. ábrán a nyers intenzitás és az üres cella szórt intenzitásának képét láttuk a 2 mólos LiCl oldatra. Megfigyelhetjük, hogy az üres mintatartó szórása sok helyen akár két nagyságrenddel is kisebb a nyers intenzitásnál, de nagyobb  $s$  értékeknél ez a viszony lényegesen rosszabb. Ez a kép azonban csalóka, mert az abszorpció hatását nem vettük figyelembe. Ennek korrekciója éppen a felső  $s$ -tartományban okoz igen jelentős változást, méghozzá a teljes mintára jóval nagyobb, mint az üres cellára. A 8. ábra az  $I_{\text{corr}}$  intenzitását mutatja be ugyanarra az oldatra, valamint

a belőle levont  $I_{\text{cella}} \cdot e^{-\frac{(\mu d)_{\text{oldat}}}{\cos \vartheta}}$  függvényt. Megjegyzendő, hogy ezek a korrekciók csak a minta járulékai és a levont rész közötti helyes nagyságrendet állítják vissza, de az egyes mért értékek relatív hibáját átörökítik.

Az adatfeldolgozás további (5)–(8)-ig számozott lépései már nem a kísérleti függvények közvetlen korrekcióját célozzák, hanem az önkényes egységekben kife-



8. ábra. Korrigált intenzitás és a levont cella-szórás (2m LiCl)

jezett  $I_{\text{corr}}$  értékek elektron-egységekben kifejezett, „abszolút” értékekre való átszámítását, és a folyadék szerkezetére nem jellemző atomi szórás leválasztását. Mivel ez utóbbit felhasználjuk az abszolútizálásakor, sorrendben ezt tárgyalom először.

(5) A független atomi szórás számítása. A szórt intenzitásban szerepel az egyes atomok (ionok, vízmolekulák) független koherensszórásának összege (a (17) egyenlet első tagja), amely elméleti úton számítható. Az egyes szórási amplitúdók számításáról és a táblázatba rendezett értékeiről gazdag irodalom áll rendelkezésünkre [6], [10], [20], [40]. A gyakorlatban használt  $s$  értékek azonban a táblázatok értékeitől eltérnek. Ezért — valamint a részecskék egyes fizikai tulajdonságainak számításához — igen hasznos a szórási amplitúdókat analitikus alakban előállítani. Az általam használt analitikus függvényeket Hajdu F. úgy határozta meg, hogy a 9 paramétert tartalmazó analitikus alakokat a legkisebb négyzetes módszerrel illesztette Tavard et al. [40] táblázatának értékeihez. Ennek alapján az  $\alpha$  típusú részecske szórási amplitúdójának alakja:

$$f_{\alpha}(s) = \sum_{i=1}^4 a_{i\alpha} e^{-b_{i\alpha} \left(\frac{s}{4\pi}\right)^2} + c_{\alpha}. \quad (37)$$

(6) A Compton-szórás. A szórt sugárzás inkohereus része méréseink szempontjából „parazita szórásnak” tekintendő, a mért szórási intenzitásból tehát le kell vonni. Egy adott típusú részecske Compton-szórása  $s$ -függő,  $s=0$ -ban zérus,  $s \rightarrow \infty$  határátmenetnél az elektronszámhoz tart. A gyakorlatban felhasználható analitikus kifejezésekre több változattal is rendelkeztem, végül is a vízmolekulára és a  $\text{Cs}^+$



ionra a Hajdu F. [13] által megadott

$$I_{\text{inc}, \alpha}(s) = \left( Z_{\alpha} - \frac{f_{\alpha}}{Z_{\alpha}} \right) \left( 1 - me^{-\frac{ks}{4\pi}} - e^{-\frac{ls}{4\pi}} \right) \quad (38)$$

alakú, az  $f_{\alpha}$  paramétereivel együtt 12 paraméteres alakot használtam. Más atomok és ionok mellett a többi kation és a  $\text{Cl}^{-}$  ion inkohere szórására Pálincás Gáborral új analitikus alakot határoztunk meg [32]. Ezek 6 paramétert tartalmaznak:

$$I_{\text{inc}, \alpha}(s) = Z_{\alpha} \left[ 1 - \sum_{i=1}^3 \frac{\gamma_i}{(1 + \lambda_i s^2)^4} \right]. \quad (39)$$

Ez utóbbinak többek között előnye az, hogy a koherens szórás amplitúdót nem tartalmazza. A numerikus értékek az International Tables for X-Ray Crystallography [20], ill. Freeman és Watson [10] adatai voltak.

(7) Az abszolutizálás. Az előző két lépésben meghatározott függvények a „totális atomi szórás” adják:

$$I_{\text{tot}}(s) = \sum_{\alpha=1}^{\mu} x_{\alpha} f_{\alpha}^2(s) + \sum_{\alpha=1}^{\mu} x_{\alpha} I_{\text{inc}, \alpha}(s). \quad (40)$$

Könnyen belátható, hogy a fenti kifejezés  $\sum_{\alpha=1}^{\mu} x_{\alpha} Z_{\alpha}^2$ , azaz elektronszámnégyszet dimenziójú. Ezzel szemben a mért, és így az  $I_{\text{corr}}(s)$  intenzitások önkényes egységei is a technikai körülményektől függenek (elektronikus erősítés) stb. Hogy a totális atomi szórás levonhassuk, a mért értékeket szintén elektronszám-négyszet egységekben kell kifejezni, és a szóró anyag egyazon mennyiségére kell vonatkoztatni. Ez a gyakorlatban egy normálási konstans meghatározását jelenti. A normálás alapjául a totális atomi szórás szolgálhat.

Oldataink esetében két, elvileg különböző és egymástól független módszert is alkalmaztunk. Az egyik Krogh-Moe és Norman [23], [31] eljárása, amely lényegében a koherens szórt sugarak összenergiájának megmaradásán alapul. Az így számított normálási konstans definíciója:

$$\alpha = \frac{\int_0^{s_{\max}} s^2 I_{\text{tot}}(s) ds - 2\pi^2 \left( \sum_{\alpha=1}^{\mu} x_{\alpha} Z_{\alpha}^2 \right) \varrho_0}{\int_0^{s_{\max}} s^2 I_{\text{corr}}(s) ds}. \quad (41)$$

A másik eljárás elvi alapja, hogy  $s \rightarrow \infty$  határátmenetnél az elméleti totális és a mért, abszolút skálára vonatkoztatott függvényeknek közös határértékhez kell tartaniuk. Ezért egy normálási konstans definíciója lehet a következő átlag:

$$\beta = \frac{1}{n} \left[ \sum_{i=1}^n \frac{I_{\text{tot}}(s_i)}{I_{\text{corr}}(s_i)} \right] \quad (42)$$

ahol  $n$  (a nagy  $s$  értékek tartományában) alapul vett  $s$  pontok száma. Oldatainknál az  $s > 10 \text{ \AA}^{-1}$  tartományban a 40 utolsó pontot használtuk. A kapott  $\alpha$  és

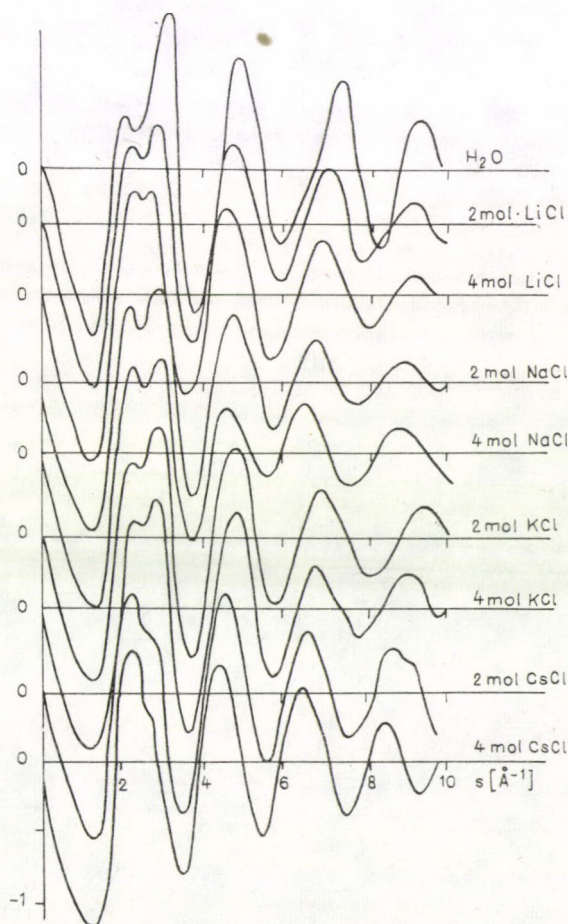
$\beta$  értékek igen jól, 0,01—0,02% eltéréssel egyeztek, ami az abszolútizálás helyességét igazolja. Formai okokból ezután az

$$I_{abs}(s) = \alpha I_{corr}(s) - \sum_{\gamma=1}^{\mu} x_{\gamma} I_{inc,\gamma}(s) \quad (43)$$

függvényt tekintettük abszolút intenzitásnak, így a kísérleti redukált intenzitás kifejezése (elektronszám-négyzetegységben)

$$si^E(s) = s \left( I_{abs}(s) - \sum_{\gamma=1}^{\mu} x_{\gamma} f_{\gamma}^2(s) \right). \quad (44)$$

(8) A módosított kísérleti redukált intenzitások előállítása. Az  $si^E(s)$  függvények igen hamar lecsengő függvények, Fourier-transzformáltjaik részletekben szegények.



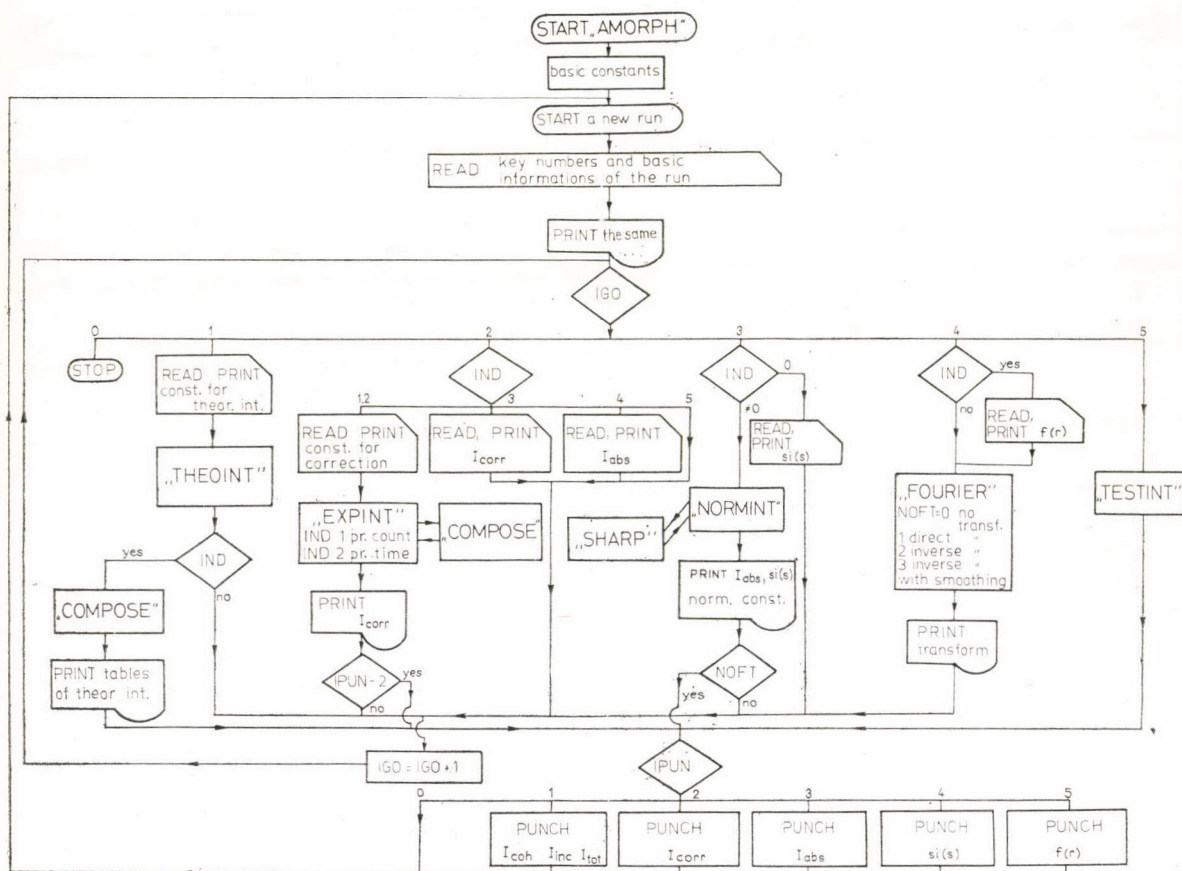
9. ábra. A „módosított” kísérleti redukált intenzitásfüggvények



A továbbiakban a részletek jobb megjelenítése érdekében a (21)-es egyenletben bevezetett osztóval leosztott alakokat, a módosított kísérleti redukált intenzitásfüggvényeket (rövidítve MKRI) használtam.

$$si^E(s) M(s) = \frac{s \left( I_{abs}(s) - \sum_{\gamma=1}^{\mu} x_{\gamma} f_{\gamma}^2(s) \right)}{\left( \sum_{\gamma=1}^{\mu} x_{\gamma} f_{\gamma} \right)^2}. \quad (45)$$

Ezek jó közelítéssel „atomi” egységekre vonatkoztatott függvényeknek tekinthetők. Ezeket tüntettem fel a 9. ábrán.



10. ábra. Az adatfeldolgozást végző számítógépprogram blokk-diagramja

### 3.3. Az adatfeldolgozás technikája

Az adatfeldolgozás előző pontban ismertetett egyes lépéseit az MTA CDC 3300-as számítógépén, az e célra írt FORTRAN nyelvű programmal hajtottam végre. A program elkészítése Hajdu Ferencsel közös munkám volt, részletes leírását az Acta Crystallographica c. folyóiratban közzéltük [18].

A program szervezése lehetővé teszi, hogy akár a teljes adatfeldolgozási folyamatot (beleértve a radiális eloszlások előállításához szükséges Fourier-transzformációkat is) egészében, akár az egyes lépéseket külön-külön, a feldolgozás tetszés szerinti fázisában kezdve elvégezhessük. Amint azt a program blokkdiagramjáról (10. ábra) leolvashatjuk, egy-egy blokk (szubrutin) lényegében egy-egy feldolgozási lépésnek felel meg.

Az egyes részek megfelelő INPUT kulcsszámokkal aktivizálhatók, és ugyanúgy állíthatók le. A THEOINT blokk a totális atomi szórást számolja, az EXPINT blokk állítja elő az  $I_{\text{corr}}(s)$  intenzitásokat, a NORMINT blokk az abszolutizálást végzi, és előállítja az  $si^E(s)$  függvényeket. A SHARP blokkban a kívánt osztó választható ki, erre négyféle lehetőség van. Végül a FOURIER blokkban a radiális eloszlások kiszámítása, inverz FOURIER transzformáció, és az álhullámok csökkentése (l. 1.4. pont) végezhető el.

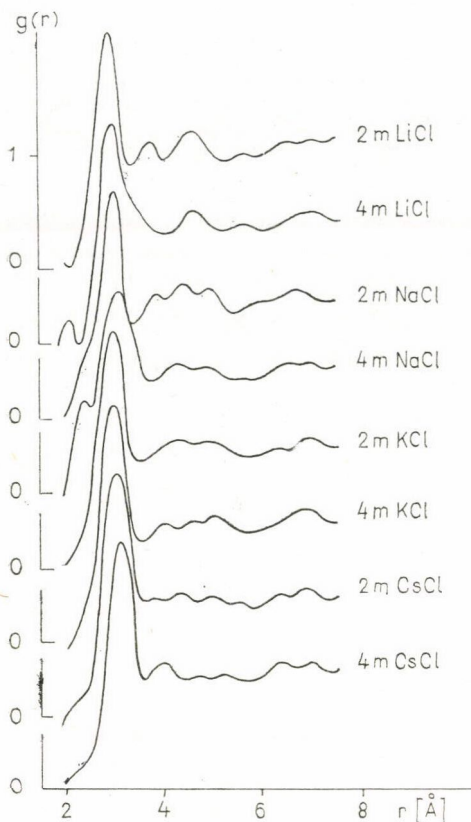
Értelemszerűen INPUT adatként szolgálnak minden esetben az adatfeldolgozás induló fázisában megkívánt függvények, továbbá a szükséges kiegészítő mérési adatok (abszorpció mérés, üres cella szórása), az elméleti függvények paraméterei (szórási amplitúdók, inkohérens szórás paraméterei,  $s$ -skála lépései), valamint az oldatot sztöchiometriailag jellemző mennyiségek (részecskesűrűség, móltörtök). OUTPUT lehet a leállítás előtti utolsó művelet eredményeképpen kapott függvény, amely kártyára is lyukasztható, vagy háttértárolón (mágneses lemez- vagy szalag) tárolható. A program egy futtatás keretén belül elvileg korlátlan számú egymás után végrehajtott, független adatfeldolgozási ciklusra képes. Külön megjegyzést érdemel, hogy habár a program egyes részletei tükrözik azt a tényt, hogy segítségével elsősorban vízen és vizes elektrolit oldatokon végzett kísérletek feldolgozását kívántuk elvégezni, minimális változtatásokkal tetszőleges amorf anyag transzmisszióban mért röntgenszórási adatainak kiértékelésére alkalmas.

### 4. Az elméleti redukált intenzitások és radiális eloszlások diszkussziója (kvalitatív leírás)

Ebben a fejezetben az  $si^E(s)M(s)$ , ill. a  $g^E(r)$  függvények menetéből kiolvasható információkkal foglalkozom. Az alkáli klorid oldatok MKRI függvényeit a 9. ábrán, párkorrelációs függvényeit (REF) a 11. ábrán mutatom be.

A MKRI függvényeket  $s=10$ -ig ábrázoltam, mivel az  $10 \leq s \leq 15 \text{ \AA}^{-1}$  tartományban a mért értékek bizonytalansága miatt ezek már csak az abszolutizálás céljaira használhatók. Meg kell jegyezni, hogy ez a bizonytalanság nem elsősorban a mérési pontatlanság következménye (hiszen minden pontban azonos számú impulzust vártunk be, így a mért értékek relatív statisztikus hibája egyenlő), hanem annak, hogy a redukált intenzitás előállításakor a kisebbitendő és kivonandó közel azonos érték, így a — ráadásul  $s$ -sel szorzott — maradékhoz viszonyítva a statisztikus





11. ábra. A kísérleti párkorrelációs függvények

szórását, a relatív hiba igen nagy érték lesz. A  $g^E(r)$  függvényeket a számunkra érdekes információkat tartalmazó  $1,8 \leq r \leq 7,5 \text{ \AA}$  tartományban tüntettem fel.

Az egyes görbék menetében határozott összefüggés tapasztalható mind a jelenlevő kation rendszámával, mind az oldat koncentrációjával. Az MKRI függvények leglátványosabb része kétségtől az  $s=2-3 \text{ \AA}^{-1}$  tartományban megjelenő kettős csúcs, de a zérushelyek eltolódása, a periódusok szabálytalanságai és az amplitúdók változó magassága éppoly egyedi jellegű valamennyi görbénél. A koncentráció változása (2 mól—4 mól) abban mutatkozik meg, hogy a kettős csúcs második maximuma letompul, a zérushelyek eltolódnak a kisebb  $s$  érték felé, a periódusok pedig rövidülnek. Ezek a jelenségek 4 mól CsCl esetében már olyan nagymértékűek, hogy az  $s=10 \text{ \AA}^{-1}$  környékén már egy új zérushely is megjelenik. Ez a jellegzetesség az  $s$ -változó és  $r$ -változó közötti reciprokl jellegű kapcsolat alapján arra utal, hogy az oldatban a koncentráció növekedtével megnő a nagyobb távolságok száma. Ez tehát azt jelenti, hogy az ionok körüli szerkezetben az átlagos távolságok nagyobbak, mint a tiszta vízben voltak. A kis sugarú kationokra ( $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ) ez a kijelentés kétséges, de a mellettük szereplő és nagyobb súlyú járulékokat szol-

gáltató  $\text{Cl}^-$ -ionokra már igen valószínű, akárcsak a nagyobb kationokra. A kvalitatív összehasonlítás kedvéért a tiszta víz általunk meghatározott [14], [15] MKRI-függvényét is felrajzoltam a 9. ábrán.

A REF-ek koncentráció változásának hatását az előző megfigyelésekkel összhangban, még szemléletesebben tükrözik. A főmaximumok helyének eltolódásai a koncentráció növekedésével: LiCl-nál  $2,96 \text{ \AA}$ -ról  $3 \text{ \AA}$ -re, NaCl és KCl-nál  $3 \text{ \AA}$ -ról  $3,1 \text{ \AA}$ -re, CsCl-nál  $3,1 \text{ \AA}$ -ról  $3,2 \text{ \AA}$ -re. Mivel ezek a csúcsok döntő részben a kation—víz, víz—víz és  $\text{Cl}^-$ —víz első szomszéd járulékokat tartalmazzák, ezek a változások is elsősorban a  $\text{Cl}^-$ — $\text{H}_2\text{O}$  távolságok megnövekedett számával magyarázhatók. A maximum helyének eltolódásán kívül a fő csúcs magasságának csökkenése és szélességének növekedése is ugyanezt támasztja alá. Nagyon fontos azonban azt kiemelni, hogy ezekből a jelenségekből nem következtethetünk arra, hogy az ionok körüli szerkezet a különböző koncentrációkban különböző lenne, hanem csak arra, hogy az ionok körüli szerkezetet meghatározó távolságokból az ionok számának növekedése folytán több van az oldatban.

A kationok változtatásának hatása a  $g^E(r)$  függvényben látszik szemléletesen.



Amint azt a kristályos ionrádiuszok alapján láthatjuk, a rendszám növekedtével a kation—víz távolság nő. A részecskék várható rádiuszait a 3. táblázat tartalmazza. Ezek az adatok Goldschmidt mérésein alapulnak [39]. A víz molekularádiuszát a víz röntgendiffrakciós méréseiből kapott 2,84 Å-os első szomszéd távolság felének vettem.

### 3. TÁBLÁZAT

Részecskerádiuszok és a várható első szomszéd távolságok

	Részecskerádiuszok (Å)		A vízmolekula rádiuszával együtt (Å)	
	Goldschmidt	Pauling	Goldschmidt	Pauling
Li <sup>+</sup>	0,73	0,56	2,15	1,98
Na <sup>+</sup>	0,92	0,89	2,34	2,31
K <sup>+</sup>	1,33	1,33	2,76	2,75
Cs <sup>+</sup>	1,79	2,05	3,12	3,47
Cl <sup>-</sup>	1,31	1,81	3,23	3,23
H <sub>2</sub> O saját mérés	1,42	—	2,84	

A LiCl-ot tartalmazó oldatok  $g^E(r)$  függvényén a Li<sup>+</sup>-víz távolság már nem olvad bele a főmaximumba, attól élesen el kell válnia. Ez a szerkezetanalízist látszólag igen megkönnyítő helyzet azonban mégsem elég kedvező a Li<sup>+</sup>—H<sub>2</sub>O távolságok járulékanak igen kicsiny relatív súlya (nem több, mint 4%-a 4 mól-os oldatánál sem), miatt. A  $g^E(r)$  függvényeken 2 Å-nél megjelenő maximum nagyságban összemérhető a többi görbén is jelentkező álhullám-maximummal. A NaCl oldatoknál a Na<sup>+</sup>—H<sub>2</sub>O járulékok hatása a főcsúcs bal oldalán kialakuló váll formájában nyilvánul meg kb. 2,4 Å-nél, amely a tömönyebb oldatnál határozottabb. Mivel a K<sup>+</sup> ion sugara igen kicsit különbözik a vízmolekuláétól, a kation-víz párok és a hasonló víz-víz távolságok járulécai ugyanarra a helyre adnak maximumot. A KCl oldatok  $g^E(r)$  függvényei fő csúcsának kialakításában tehát már kation-víz, víz-víz és klór-víz párok egyaránt részt vesznek. A helyzet a CsCl oldatok függvényein is hasonló, azzal a különbséggel, hogy ott a Cs<sup>+</sup>—H<sub>2</sub>O távolságok már a Cl<sup>-</sup>—H<sub>2</sub>O távolságokkal esnek lényegében egybe. Ez az egész főcsúcs eltolódását, kiszélesedését és aszimmetriájának erősödését eredményezi.

A  $g^E(r)$  függvények további maximumainak már részletes kvalitatív interpretációja is nehéz feladat, mert ezen csúcsok kialakításában valamennyi páreloszlás részt vesz. A 3,5—5 Å tartományban az egyes részecskéket körülvevő víz közötti távolságok lépnek fel, de nem kizárt az olyan ion-ion párok megjelenése sem, amelyek között egy vízmolekula van. Megjelenhetnek az első hidrátburkon túli vízmolekulákkal alkotott párok járulécai is. Valamennyi vizsgált oldatra jellemző, közös tulajdonság, hogy a  $g^E(r)$  függvényen kb. 5,5 Å-nél minimum, 6,5—7 Å-nél maximum található. Hasonló jellegzetességet a víz kísérleti REF-en is látunk. Ezt a jelenséget a sokféle lehetséges távolság keveredése miatt nem tulajdonítanám valamilyen élesen különváló második hidrátburkok megjelenésének, hanem egyszerűen a lehetséges távolságok statisztikus eloszlása jellegzetességének.

Az egyes távolságokhoz rendelhető rezgési amplitúdók nagyságára elvileg abból lehet következtetni, hogy milyen gyorsan csengenek le a MKRI-függvények, ill., hogy a REF-ek csúcsainak milyen a profiljuk. Ebből a szempontból érdekes



a MKRI-függvények két-két maximuma (minimума) hányadosának összehasonlítása. Ha a függvények csak egy hullámot tartalmaznának, ezekből az értékekből a rezgési amplitúdó elég jól becsülhető lenne. Tekintettel azonban arra, hogy függvényeink számos, esetenként egészen különböző rezgési amplitúdót tartalmazó hullám szuperpozíciójából adódnak, az ilyenfajta összevetés csak valamiféle átlagot szolgáltatna, amely azonban nem az egyes amplitúdók egyszerű aritmetikai középértéke. Az összehasonlítást bizonytalanná teszi az is, hogy a megfelelő maximumok egymástól eléggé eltérő  $s$ -értékeknél jelentkeznek, valamint az MKRI-ekben szereplő osztók  $s$ -függése is eltérő. A 4. táblázat a  $3,4\text{--}3,8 \text{ \AA}^{-1}$  és a  $7,8\text{--}8,1 \text{ \AA}^{-1}$  körüli minimumokra, valamint a  $4,3\text{--}4,9 \text{ \AA}^{-1}$  és  $8,4\text{--}9,4 \text{ \AA}^{-1}$  körüli maximumokra számolt hányados értékeket tünteti fel. Látható, hogy mind az egymásnak megfelelő helyen vett hányadosok értékeit, mind a két-két hányados közötti eltérések jellegét tekintve a szórás nagy, és a tendencia nem egyértelmű. Ezek a számok tehát nem szolgáltatnak nyilvánvaló információt sem a kation, sem a koncentráció változtatása kapcsán megváltozó rezgési amplitúdó értékekről.

#### 4. TÁBLÁZAT

Hányadosok a rezgési amplitúdók becsléséhez

Oldat	$si^E(s)$ értékek		Hányados	$si^E(s)$ értékek		Hányados
	$s = 9 \text{ \AA}^{-1}$	$s = 4,6 \text{ \AA}^{-1}$		$s = 7,7 \text{ \AA}^{-1}$	$s = 3,6 \text{ \AA}^{-1}$	
2m LiCl	0,14	0,55	0,255	-0,24	-0,85	0,282
4m LiCl	0,18	0,54	0,333	-0,22	-0,78	0,282
2m NaCl	0,15	0,26	0,577	-0,22	-0,75	0,293
4m NaCl	0,19	0,46	0,413	-0,21	-0,59	0,356
2m KCl	0,18	0,60	0,300	-0,25	-0,84	0,298
4m KCl	0,17	0,58	0,293	-0,17	-0,83	0,205
2m CsCl	0,20	0,47	0,426	-0,17	-0,65	0,262
4m CsCl	0,12	0,35	0,343	-0,16	-0,42	0,381

### 5. Az első szomszéd-modellezés és a kapott szerkezeti paraméterek

#### 5.1. Az első szomszéd-modellek leírása

Az 1.4. pontban tett megfontolások alapján a részletes szerkezetanalízist az MKRI-függvények modellezésével végeztem el. Az eljárás lényege az, hogy a szerkezetre tett (geometria, fizikai jellegű) feltevések alapján „felépítettem” az MKRI-függvényekhez hasonló  $si(s)^T M(s)$  módosított elméleti redukált intenzitásfüggvényeket (MERI). Ezek az  $s$  változón kívül a keresett szerkezeti paraméterek, távolságok, rezgési amplitúdók, koordinációs számok analitikus függvényei voltak. A cél az volt, hogy valamennyi vizsgált oldatra megtaláljam a szerkezeti paraméterek egy olyan halmazát, amely mellett az elméleti függvény a lehető legjobban leírja a kísérleti függvényt. A két függvény illesztését a legkisebb négyzetek módszerével végeztem el.

A MERI függvények konkrét alakja természetesen a kialakított modellektől függ. Az irodalomból is ismeretes első szomszéd-modellek (first neighbour model, FNM) közös vonása az, hogy az oldatot különálló szerkezeti egységekből állóknak

képzjük el, amelyeket csak az első szomszédok (pl. központi részecske és a hidrat-burok vízmolekulái) geometriai viszonyaival határoznak meg. Az ilyen egységeken belüli paramétereket igyekszünk meghatározni, az egységeken kívüli folyadékot azonban már kontinuumnak tekintjük. A továbbiakban az általam használt FNM-változatot ismertetem. A modellt és a segítségével az alkáli kloridok vizes oldataira meghatározott szerkezeti paramétereit ismertettem a VIII. Magyar Diffrakciós Konferencián [35].

A MERI-függvényeket a következő alakban vettem fel:

$$si(s)^T M(s) = I_d + I_c, \quad (46)$$

$$I_d = \sum_{k=1}^3 X_k \sum_i \sum_j \frac{f_i^{(k)} f_j^{(k)}}{\left( \sum_{\alpha=1}^{\mu} x_{\alpha} f_{\alpha} \right)^3} \cdot \frac{\sin sr_{ij}}{r_{ij}} e^{-\frac{l_{ij}^2}{2} s^2}, \quad (47)$$

$$I_c = \sum_{k=1}^3 \frac{x_k x_3 f_k f_3}{\left( \sum_{\alpha=1}^{\mu} x_{\alpha} f_{\alpha} \right)^2} \cdot \frac{sr_{0k} \cos(sr_{0k}) - \sin(sr_{0k})}{s^2} \cdot e^{-\frac{l_{0k}^2}{2} s^2}. \quad (48)$$

Az összeg két tagja közül az első a modellben figyelembe vett diszkrét távolságok intenzitásjárulékát, a második pedig a folytonos közeg járulékát írja le.

Az  $I_d(s)$  függvényben az összegzés  $k$  szerint 1—3-ig terjed. Ez annak a képnek felel meg, hogy az oldatban három független szerkezeti egységet tételezünk fel, ezek intenzitásjárulékát külön-külön számoljuk ki. Egy-egy szerkezeti egység magját egy-egy kation, anion, illetve vízmolekula képezi, és körülötte tetra-, okta- vagy hexaédes szimmetria szerint helyezkednek el a szomszédos vízmolekulák. A koordinációs szám ezek szerint 4, 6 vagy 8. A középpontba képzelt részecske és a vízmolekulák közötti távolságokon kívül még a szerkezeti egység víz-víz távolságai is szerepelnek az összegzésnél. Az  $i$  és  $j$  indexek szerinti összegzés tehát valamennyi, a szerkezeti egység feltételezett geometriai viszonyai által adódó távolságra kiterjed, értelemszerűen megszorozva a víz-víz jellegű távolságokat  $f_{\text{H}_2\text{O}}^2$ -val, az ion-víz jellegűeket pedig  $f_{\text{ion}} \cdot f_{\text{H}_2\text{O}}$ -val. Az egyes szerkezeti egységek arányát az „új”  $X_k$  móltörtök jellemzik. Ezek definíciója:

$$X_k = \frac{M_k}{M}, \quad (49)$$

ahol  $M_k$  az oldatban található  $k$  típusú szerkezeti egységek száma,  $M = \sum_{k=1}^3 M_k$ .

Mivel a szerkezeti egységek a vízmolekulák egy-egy centrum körüli „szétosztásával” jönnek létre, az  $X_k$  móltörtök felírhatók az  $x_k$  „atomi” móltörtök segítségével:

$$\begin{aligned} X_1 &= \frac{v_3 x_1}{x_3 + (v_3 - v_1) x_1 + (v_3 - v_2) x_2}, \\ X_2 &= \frac{v_3 x_2}{x_3 + (v_3 - v_1) x_1 + (v_3 - v_2) x_2}, \\ X_3 &= \frac{x_3 - v_1 x_1 - v_2 x_2}{x_3 + (v_3 - v_1) x_1 + (v_3 - v_2) x_2}. \end{aligned} \quad (50)$$



Itt az 1, 2, 3 index rendre a kationt, aniont, ill. vizet jelöli,  $v_k$  pedig a  $k$  típusú centrumot körülvevő vízmolekulák száma. Az 5. táblázat az így számított  $X_k$  mól-törteket tartalmazza különböző szimmetriafeltevések mellett a vizsgált koncentrációkban.

## 5. TÁBLÁZAT

Szerkezeti egységekre számított mól-törtek

Koncentráció	$v_1$	$v_2$	$v_3$	$X_1$	$X_2$	$X_3$
2 mól/l	4	6	4	0,1551	0,1551	0,6898
	6	6	4	0,1681	0,1681	0,6637
	8	6	4	0,1836	0,1836	0,6329
4 mól/l	4	6	4	0,3363	0,3363	0,3274
	6	6	4	0,4042	0,4042	0,1915

Nyilvánvaló tehát, hogy az első szomszéd-modellben a radiális eloszlási függvényekből megállapítható átlagos koordinációs (hidratációs) számok szerepét a szimmetriafeltevésből adódó  $v_i$  számok vették át. A korábbi első szomszéd-modellekhez képest [26], [29] új az, hogy az ionok körüli első koordinációs szférákban nem szereplő víz, ún. „szabad” vagy „maradék” víz szerkezetét is megkíséreltem leírni. Mint már a 2.1. pontban ismertettem, mások a harmadik szerkezeti egység bevezetése helyett a maradék víz levonásával próbálkoztak. A szerkezeti egységek felvételénél az ion-ion párok járulékait már figyelmen kívül hagytam.

A (46) egyenlet második tagja, az  $I_c(s)$  függvény felel meg az első szomszéd szerkezeten túli folytonos közeg szórásának. A modellben ezek szerint 3 különböző  $r_{0k}$  érték határozható meg, a hozzájuk tartozó  $I_{0k}$  paraméterekkel együtt. Az előbbieket szemléletes jelentése az, hogy a  $k$  típusú szerkezeti egység centrumából kiindulva,  $r_{0k}$  távolságokon kívül homogén folyadék van, amelynek szórási intenzitása hozzáadódik a diszkrét távolságoknak megfelelő részhez. Az  $r_{0k}$  sugarú gömbön belül a folyadék homogenitása megszűnik. Az ilyen eloszlás párkorrelációs függvénye a  $0 \leq r \leq r_{0k}$  tartományban 0 értékű, azon túl 1. Mivel pedig a Fourier-transzformáció integranduszában a  $g(r)-1$  függvény szerepel, a homogén folyadéknak megfelelő tag a következő alakban jelenik meg az intenzitásban:

$$\frac{sr_{0k} \cos(sr_{0k}) - \sin(sr_{0k})}{s^2}.$$

Mivel nem valószínű, hogy a homogén tartományba való átmenet  $r$  növelésével a valóságban hirtelen ugrás lenne, ezt rezgési amplitúdó jellegű  $I_{0k}$  paraméterekkel „damping factor” tompítjuk. Ez magyarázza a (48) egyenletben szereplő exponenciális tényezőt. Három ilyen függvény szuperpozíciója lényegében az  $I_c(s)$  függvény.

Végül az  $I_c(s)$  három járuléka súlyának megállapításakor az „atomi” mól-törteket használtam, abból kiindulva, hogy a kontinuum szóróképesége független a hozzátartozó szerkezeti egység geometriai felépítésétől.



## 5.2. A modellek illesztése a kísérleti függvényekhez.

### A nyert szerkezeti paraméterek

A különböző lehetséges szerkezeti elképzelések közül ki kell választani azt vagy azokat, amely a valóságos folyadékszerkezet legvalószínűbb leírását adja. Ennek természetes kritériuma az, hogy a modell paramétereivel előállított elméleti intenzitásfüggvények a lehető legjobban reprodukálják az MKRI-függvényeket. Ezt a követelményt matematikailag megfogalmazhatjuk például úgy, hogy a kétféle függvény értékei pontonként vett különbségének négyzetösszege legyen minimális:

$$F = \sum_{k=1}^N [s_k i(s_k)^T M(s_k) - s_k i(s_k)^E M(s_k)]^2 = \text{minimum.} \quad (51)$$

Itt az  $s_k$  jelölés a  $k$ -adik figyelembe vett  $s$  értékre utal,  $N$  az összes olyan  $s$  pontok száma, amelyet az illesztésnél felhasználtunk.

A MERI-függvények változói a szerkezeti paraméterek, így a minimalizálandó  $F$  függvény is ezek többváltozós függvénye. Ha az  $i$ -edik paramétert  $p_i$ -vel jelöljük, az (51) előírás teljesülésének szükséges és elegendő feltétele, hogy egyidejűleg

$$\frac{\partial F(p_1, p_2, \dots, p_n)}{\partial p_i} \equiv 0 \quad (52)$$

fennálljon minden  $i$ -re. Mivel az elméleti függvények analitikus alakban adóttak, a parciális deriváltak formálisan kiszámíthatók. A problémára végül is egy olyan lineáris egyenletrendszer írható fel, amelynek változói a paraméterek kezdeti és a minimumhoz tartozó értékeinek különbségei („shifttek”). Tekintettel azonban a parciális deriváltak számításának bonyolultságára és a lineáris egyenletrendszer megoldásakor felmerülő algebrai problémákra, a minimumkeresés technikai megvalósításához a jóval szemléletesebb, modernebb simplex módszert választottam. Ennek lényege az, hogy az  $n$  paraméter által definiált  $n$  dimenziós térben a paraméterek aktuális értékei szabályos konvex idomot, simplexet definiálnak. Elemi geometriai transzformációk (reflexió, kontrakció és expanzió) segítségével elérhetjük, hogy a simplex az  $n$ -dimenziós térben a minimumhely felé „vándorolva” és a minimumhely közelében összehúzódva „letapogassa” az  $F$  függvényt. A módszer részletes matematikai leírását Nelder és Mead cikkében találtam meg [30].

A minimum számításra alkalmas programhoz felhasználtam a CDC 3300-as számítógép könyvtári segédprogramját, némileg átdolgozva.

Ennek a minimumkeresési technikának igen nagy előnye, hogy a paraméterek változása szemléletesen nyomon követhető. Megállapítható, mikor konvergál egy-egy paraméter. Ilyenkor változásai egyre kisebbek, és a négyzetösszeg is egyre érzékenyebb rá. Azonnal leolvasható, melyek azok a paraméterek, amelyek egyidejű változtatása nem zavarja a többi konvergenciáját (korrelálatlan paraméter). A minimalizálás bármely szakaszában a program megállítható, és kedvezőbb paraméterhalmazzal újra indítható. Hátránya a gradiens módszerrel szemben, hogy gépidő igényesebb, és nem szolgáltat „automatikusan” szórás- és korrelációs mátrixot.

Az alkáli klorid oldatokban a paraméterek nagy száma miatt a minimumkeresést több lépésben végeztem el. A paraméterek száma természetesen függött az elképzelt első szomszéd geometriától, végső soron a kation körüli szerkezeti



egység szimmetriája döntötte el. Legkevesebb a tetraédes szimmetriájú kationt tartalmazó 2 mólos LiCl oldatnál ( $n=16$ ), legtöbb a hexaédes kation — a víz szimmetriájú 2 m CsCl oldatnál ( $n=18$ ) volt. A paramétereket blokkokba csoportosítottam. Az első blokk 6 változót tartalmazott, a folytonos közegre jellemző  $r_{ok}$ ,  $l_{ok}$  paramétereket. Ezek változtatásával főleg a görbék elejének jó illesztését igyekeztem elérni. A második csoportba szintén 6 változót, az első szomszéd távolságokat és rezgési amplitúdókat soroltam. Ezeket úgy engedtem változni, hogy közben az első szakaszban elért legjobb értékeket helyettesíttem  $r_{ok}$ ,  $l_{ok}$  helyébe. A következő lépésben a harmadik blokk 4–6 paraméterét változtattam, ezek a szerkezeti egységen belüli második szomszédok, azaz a hidrat-vizek közötti távolságok rezgési amplitúdói voltak. A távolságok értékeit mindvégig az ion-víz távolságokból a feltételezett szimmetriának megfelelő módon számítottam. Az így blokkonként beállított paramétereket együtt is változtattam, előbb a két első csoportot egyszerre (12 paraméter), végül valamennyi paramétert egyidejűleg. Ezt a folyamatot több modellre (tetraédes, oktaédes, hexaédes alakzat) megpróbáltam.

Mivel a kezdőérték helyes megválasztása lényegesen megkönnyíti a konvergenciát, igyekeztem nyilvánvaló, ill. könnyen értelmezhető adatokból kiindulni. Első szomszéd távolságoknak a részecske rádiuszok összegét,  $r_{ok}$  értékének a szerkezeti egységekben várható legnagyobb távolság körüli értéket választottam. A rezgési amplitúdók kezdőértékeire a víz szerkezetanalízisének nyert hasonló távolságok amplitúdóinak értékéből, ill. abból a feltevésből indultam ki, hogy a nagyobb távolságok amplitúdói is megfelelően nagyobbak.

Az egész minimalizálási folyamat oldatonként kb. 1/2 óra számítógépidőt vett igénybe. A simplex mozgáshoz az  $F$  függvény értékét minden oldatra 300–500-szor kellett kiszámítani, eközben a négyzetösszeg kb. 4 nagyságrendet zuhant.

Mivel kísérleti függvényeink a  $0 \leq s \leq 5 \text{ \AA}^{-1}$  tartományban  $0,05 \text{ \AA}^{-1}$ -enként,  $5 \leq s \leq 10 \text{ \AA}^{-1}$  tartományban  $0,1 \text{ \AA}^{-1}$ -enként álltak rendelkezésemre, ez 101 pontot jelentett. A nagyobb  $s$  értékeket a kísérleti függvények pontatlansága miatt már elvettem. Nem tartottam azonban indokoltnak, hogy a kisebb  $s$  értékeket kétszeres sűrűséggel véve figyelembe, ezeket erősebben súlyozzam, így ebben a tartományban minden második pontot elhagyva, a minimalizáláshoz 72 pontot használtam.

A fit „jóágát” két paraméterrel mértem. Az egyik maga a legkisebb négyzetösszeg, azaz

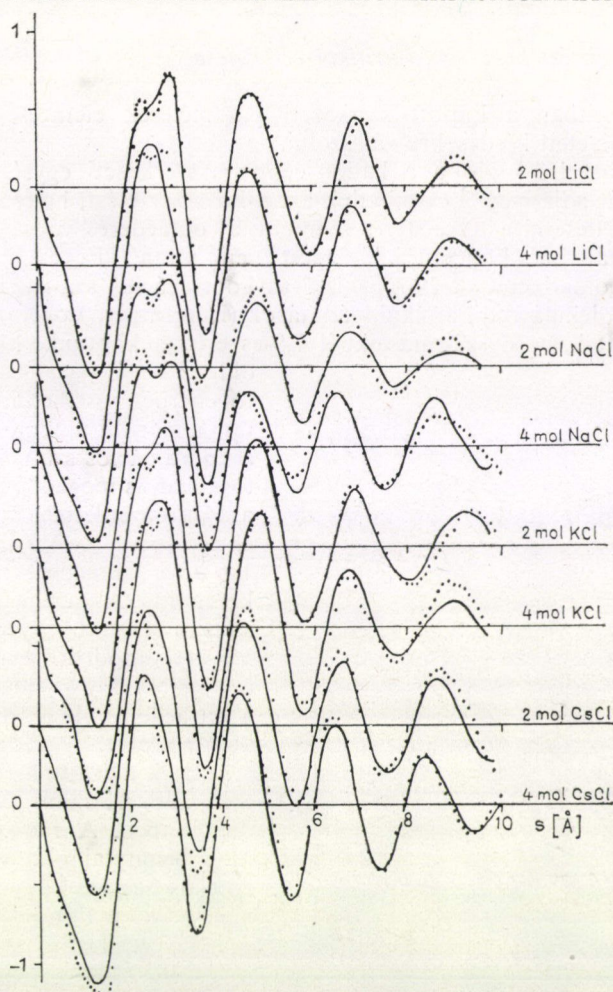
$$\varepsilon = F_{\min} = \sum_{k=1}^{72} [s_k i(s_k)^T M(s_k) - s_k i(s_k)^E M(s_k)]_{\text{minimum}}^2. \quad (53)$$

Ez az érték azonban nyilván függ a pontok számától. A másik,  $\varepsilon'$  paraméter definíciója a következő:

$$\varepsilon' = \sqrt{\frac{\varepsilon}{N}}, \quad (54)$$

ahol  $N=72$  volt. Ez a minimum elérésekor a kísérleti és elméleti függvények átlagos eltéréseinek tekinthető. A teljes szerkezetanalízis végén adódott  $\varepsilon$ ,  $\varepsilon'$  értékeket tünteti fel a 6. táblázat. A legjobb MERI és MKRI függvények, valamint Fourier-transzformációjukból kapott  $D^E(r)$  és  $D^T(r)$  függvények alakját 12., 13. ábrán láthatjuk. A szerkezetanalízis végén kapott szerkezeti paraméterek értékeit a 7–9. táblázat mutatja be.





12. ábra. A modellből számolt (MERI, folytonos vonal) és a kísérleti (MKRI, pontok) redukált intenzitásfüggvények az illesztés után

#### 6. TÁBLÁZAT

Az elméleti és kísérleti függvények eltérésére jellemző paraméterek

	$\varepsilon$	$\varepsilon'$
2m LiCl	0,645	0,0646
4m LiCl	0,587	0,0605
2m NaCl	0,787	0,0754
4m NaCl	0,704	0,0665
2m KCl	0,473	0,0577
4m KCl	0,870	0,0725
2m CsCl	1,119	0,0814
4m CsCl	1,562	0,0972



### 5.3. A paraméterek értelmezése és kritikai értékelése

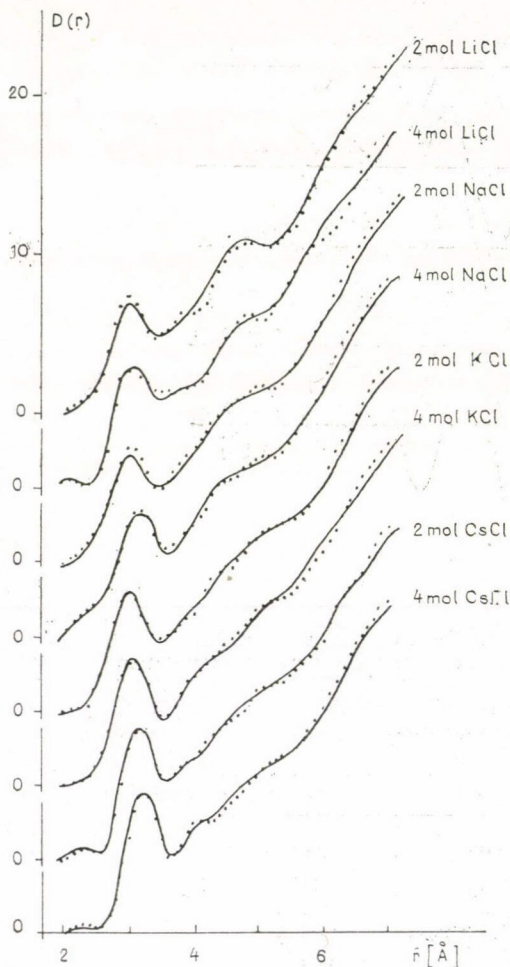
Ebben a pontban a kapott szerkezeti paraméterek elemzésével igyekszem a 2.2. pontban felvetett kérdésekre válaszolni.

A 7. táblázat első oszlopa a kation centrum szerkezeti egységben levő vízmolekulák számát adja meg. Levonhatjuk azt a következtetést, hogy a kation rendszámának növekedésével a tetraédes szimmetriát oktaédes váltja fel. Ez a tény a mérési tartományban koncentrációfüggést nem mutat. Egyetlen kiugró érték a 2 mól CsCl oldatban  $\text{Cs}^+$  körüli víz 3-as koordinációs száma. Érdekes megjegyezni, hogy molekuláris dinamikai számítások (Heinzinger, Vogel [19]) is hasonló eredményre vezettek, az ő számításaikból 7,9-es értéket kaptunk. Mivel ennek az

oldatnak más paraméterei is a többitől eltérően viselkednek, megpróbáltam a modellt úgy módosítani, hogy a koordinációs számok értékét pontosabban is megadhasam. E szerint a (47) egyenletben  $I_d$  kiszámítását elvégeztem  $x\%$  hexaédes és  $100-x\%$  oktaédes „kevert” szerkezettel is. A paraméterek finomítása nem vezetett lényeges változásra,  $x=99\%$  adódott. Hasonló próbát a 4 mól LiCl oldatra is tettem, a tetraédes/oktaédes arányra itt  $96\%$  adódott.

Ezek a számok jól összeférnek a korábbi irodalmi adatokkal, minden esetben. A radiális eloszlásból nagy bizonytalansággal meghatározott alsó és felső becslések közé esnek. A modell pontosságán belüli  $\pm 1$  egyezés látható Narten és társai  $c_{\text{Li}^+}=4$ -es, Licheri és társai  $c_{\text{Li}^+}=4$ -es és  $c_{\text{Na}^+}=4$ -es, van Beurten  $c_{\text{Na}^+}=4,5$ -es és  $c_{\text{K}^+}=5$ -ös értékeivel.

A kation-víz első szomszéd távolságok igen érdekes összefüggéseket mutatnak. Általában megállapítható, hogy a részecskeráduszok összegéből számolt távolságok (3. táblázat) megegyeznek, vagy valamivel kisebbek az illesztésből kapott értékeknél (7. táblázat második oszlopa). Az esetleges „lazulás” magyarázata az lehetne, hogy az ionok és a víz között fellépő erők gyengébbek, mint az ionkristályokban fellépők. A távolságok értékei között



13. ábra. A MERI, ill. MKRI függvényeknek megfelelő radiális eloszlások



## 7. TÁBLÁZAT

Az első szomszéd-modellezéssel nyert paraméterek. Kation központú szerkezeti egység

	<i>n</i>	Távolság	Ampl.	Második szomszéd			<i>r</i> <sub>01</sub>	<i>l</i> <sub>01</sub>
2m LiCl	4	2,17	0,262	0,541	—	—	5,37	1,208
4m LiCl	4	2,08	0,254	0,270	—	—	4,58	0,410
2m NaCl	4	2,53	0,244	0,392	—	—	6,00	0,114
4m NaCl	4	2,42	0,206	0,612	—	—	6,01	0,303
2m KCl	6	2,94	0,142	0,270	0,567	—	5,31	1,023
4m KCl	6	2,90	0,152	0,391	0,401	—	4,85	0,0101
2m CsCl	8	3,15	0,218	0,143	0,505	0,421	3,51	0,089
4m CsCl	6	3,15	0,194	0,652	0,198	—	3,33	0,186

koncentráció- és rendszámfüggés tapasztalható. A kation rendszámával való növekedés trivialis, a kationok különböző sugarával magyarázható. A koncentrációfüggés iránya olyan, hogy nagyobb töménységnél a távolságok rövidebbnek adódnak (a CsCl-nál ez a második tizedesjegyben nem érződik). A megfelelő rezgési amplitúdók változása bizonytalanabban bár, de hasonló irányba mutat. A koncentráció növelésének „tömörítő” szerepe valószínűleg az ionok ismert elektrostrikiós hatásának megnyilvánulása kísérleteinkben.

A kation-víz rezgési amplitúdók a rendszám növekedtével csökkennek, majd a  $\text{Cs}^+ - \text{H}_2\text{O}$  távolságnál nőnek. A csökkenés a szerkezet merevedésére utal, ami a kötőerők növekedésével magyarázható. Ez ellen ható tényező a távolság abszolút értékének növekedése, amely úgy látszik, a  $\text{Cs}^+ - \text{H}_2\text{O}$  kölcsönhatásnál már ellentétes tendenciát hoz létre.

A második szomszéd távolságok amplitúdói már nagyobb ingadozást mutatnak. Amint az várható, számértékük egy kiugró érték kivételével mindenütt nagyobb az első szomszéd rezgési amplitúdókéénál, ami természetes következménye a koordináló vízmolekulák közötti kisebb kölcsönhatásoknak.

Az anion körüli szerkezet paramétereit vizsgálva (8. táblázat) az egyértelműen 6-os koordinációs szám azonnal szembetűnik. Ez kitűnő egyezésben van azzal a 2.1. pontban említett tapasztalattal, hogy a klorid ion koordinációs száma a más elektrolitoknál is mért 6-os érték. A  $\text{Cl}^- - \text{H}_2\text{O}$  távolságok értékében tapasztalható szabályosság nem annyira meggyőző, mint a kation-víz távolságoknál volt. A na-

## 8. TÁBLÁZAT

Az első szomszéd modellezéssel nyert paraméterek. Klorid központú szerkezeti egység

	<i>n</i>	Távolság	Ampl.	Második szomszéd			<i>r</i> <sub>02</sub>	<i>l</i> <sub>02</sub>
2m LiCl	6	3,06	0,188	0,314	0,360	—	5,93	0,327
4m LiCl	6	3,04	0,195	0,467	0,393	—	5,31	0,853
2m NaCl	6	3,02	0,268	0,248	0,451	—	5,69	0,341
4m NaCl	6	3,12	0,170	0,389	0,257	—	3,67	1,007
2m KCl	6	3,10	0,237	0,634	0,546	—	5,88	0,466
4m KCl	6	3,19	0,140	0,293	0,291	—	5,09	2,363
2m CsCl	6	3,09	0,141	0,432	0,478	—	6,23	0,267
4m CsCl	6	3,16	0,141	0,669	0,552	—	6,06	0,101



gyobb rendszámú kationok mellett az anion-víz távolság értékében némi növekedés látható, amely inkább a 4 mólos oldatoknál jelentkezik. Az adatok szórása folytán azonban csak azt állíthatjuk, hogy a  $\text{Cl}^- - \text{H}_2\text{O}$  távolság 3,1 Å körül ingadozik. Ez kb. 0,1 Å-mel kisebb érték annál, mint amelyet a részecskék rádiuszának összegéből várnánk, és annál is, amit korábbi mérések alapján állítanak (Lawrence—Kruh: 3,15—3,2 Å; Narten 3,1—3,2 Å; Licheri 3,13—3,2 Å; van Beurten 3,15 Å). Az, hogy egyértelmű monoton jellegű szabályosság a számokban nincs, nem különösebben meglepő. Ez a tény az állandó koordinációs számmal együtt azt sugallja, hogy a  $\text{Cl}^-$ -víz kölcsönhatás lényegében független a jelenlevő kationtól. Megjegyzendő, hogy ez a megállapítás egyben modellünk tesztje is lehet. Ha ugyanis az első szomszéd szerkezeti egységeken kívül levő részecskéknak jelentős szerepe lenne a szerkezet kialakításában, a paraméterek nem lehetnének ennyire „uniformizáltak”. Egyes szerzők ehhez a képhez azt a magyarázatot fűzték, hogy a  $\text{Cl}^-$ -ion az oldat részecskéi közötti üregekben helyezkednek el [2]. Az anionoknak a vízmolekulákkal való kölcsönhatása általában gyengébb, mint a kationoké [9].

A maradék víz szerkezetére kapott paraméterek tetraédes koordinációt jeleznek (9. táblázat). Ez lényegében a tiszta vízre jellemző szimmetria. A centrumban

#### 9. TÁBLÁZAT

Az első szomszéd modellezéssel nyert paraméterek. Víz központú szerkezeti egység

	<i>n</i>	Távolság	Ampl.	Második szomszéd			<i>r</i> <sub>03</sub>	<i>l</i> <sub>03</sub>
2m LiCl	4	2,91	0,141	0,258	—	—	2,52	0,014
4m LiCl	4	2,95	0,171	0,420	—	—	2,59	0,008
2m NaCl	4	3,01	0,142	0,356	—	—	2,57	0,0119
4m NaCl	4	3,02	0,141	0,650	—	—	2,51	0,027
2m KCl	4	2,98	0,217	0,275	—	—	2,51	0,0049
4m KCl	4	3,03	0,143	0,310	—	—	2,54	0,027
2m CsCl	4	2,92	0,173	0,586	—	—	3,20	1,009
4m CsCl	4	2,93	0,250	0,323	—	—	3,07	0,429

levő és a csúcsokban levő vízmolekulák távolságára gyakorlatilag 2,9—3,0 Å adódott, ami kb. 0,1 Å-mel nagyobb a tiszta víz szerkezetére jellemző 2,84 Å-ös első szomszéd távolságnál. Ez a lazulás olyan jellegű, mintha a víz hőmérséklete jóval magasabb lenne. A jelenség valószínű magyarázata abban keresendő, hogy az oldatban kevés a maradék víz, ezek összeállása szabályos tetraéderekké nemigen várható. Valószínű, hogy az átlagos tetraédes szimmetria jórészt a maradék víz molekuláinak az ionok körüli hidrat-víz molekuláival való érintkezéseiből és lecserélődéséből jön létre. Ugyanerre mutat az is, hogy a nagyobb koncentrációjú oldatban a szóban forgó távolságok értéke valamivel nagyobb, mint a megfelelő kationt kisebb koncentrációban tartalmazóban. Mindenesetre megállapíthatjuk, hogy a maradék víz szerkezetét a tiszta oldószer szerkezetével azonosnak tekinteni hiba volna, így a korábbi gyakorlatnak megfelelően, a víz kísérleti görbéjét az oldat kísérleti görbéjéből levonni helytelen, a szerkezetmeghatározásba indokolatlan pontatlanságot visz be.

A homogén közeg határait szolgáltató  $r_{0k}$ ,  $l_{0k}$  paraméterek egy-két kiugrástól eltekintve, hasonlóan viselkednek az egyes oldatokban. Általános jellemzésüknél feltűnő főként az  $l_{0k}$  értékekben mutatkozó helyenkénti bizonytalanság, és az



$r_{0k}$  értékek kicsiny volta. Az  $r_{01}$  értékek (kation körüli folytonos közeg kezdő sugara) a rendszám növekedtével csökkennek, míg az  $r_{02}, r_{03}$  értékek lényegében a kation rendszámától függetlenek. Ez az adat is alátámasztja az első szomszédmodellek jó érvényességét. A  $\text{Cs}^+$  kationra és a víz centrumra vonatkoztatott értékek kivételével valamennyi sugár lényegében a szerkezeti egység távolságával mérhető össze. (3 Å-ös centrum-csúcs távolságú oktaédernél ez az érték 6 Å.) Ez helyesen követi azt a durva képet, hogy a legnagyobb diszkrét távolság körül van az a határ, amelyen túl az egyes távolságok megkülönböztethetetlenek egymástól. A kis  $r_{0k}$  értékek azonban a kép finomítását igénylik. Eszerint a távolságok nem csak azért látszhatnak megkülönböztethetetleneknek, mert egyre rohamosabban növekvő a számuk és közel eső értékeik miatt folytonos spektrumot alkotnak, hanem azért is, mert nagyon rövid ideig léteznek, nem állnak össze viszonylag kötött szerkezetekké. Ezt a képet a maradék vízre alkalmazva, teljesen összevág a diszkrét első szomszéd távolságnál tett megfontolásokkal. A 2,5 Å-ös, a stabil H-kötéssel létrejött 2,84 Å-ös távolságnál jóval kisebb érték pedig különösen jelzi azt, hogy nem stabil, igen rövid ideig élő, feltehetően nagy rezgési amplitúdójú távolságokból álló folytonos közeg alakul ki egy-egy vízmolekula körül. A kis  $r_{0k}$  értékek mellett kicsiny  $l_{0k}$  értékek igen hirtelen átmenetet jeleznek. Ha a vízmolekulákat durva közelítéssel merev gömböknek tekintjük, a gömbök átmérőjénél kisebb távolságok nem fordulhatnak elő — ez lehet a hirtelen átmenet magyarázata.

Végül az  $r_{0k}, l_{0k}$  értékek vizsgálatánál figyelembe kell vennünk, hogy a modell feltevései szükségszerűen torzításokat tartalmaznak, legerősebben éppen a diszkrét-folytonos határátmenet kérdésében. Azt mondhatjuk, hogy az  $r_{0k}, l_{0k}$  értékek fizikai jelentésük mellett afféle segédparaméterek is, amelyek magukba olvasztják a modellek bizonytalanságait. Matematikailag az  $I_c(s)$  függvényből elvileg további diszkrét távolságokat lehetne leválasztani, a hozzájuk tartozó (egyre nagyobb) amplitúdókkal. Tekintettel azonban a paraméterek amúgy is nagy számára, véleményem szerint további szaporításuk a szerkezetmeghatározás javítása reményében azt eredményezhetné, hogy a görbék illeszkedése esetleg pontosabb lenne, de a fizikai kép elmélyítéséhez már nem járulna hozzá lényegesen.

#### IRODALOM

1. J. W. Albright, J. Chem. Phys. 56, 3783, 1971.
2. Ju. P. Alesko—Ozsevszkij, Zs. sztrukt. himii. 10, 1107, 1969.
3. P. W. van Beurten, An X-ray investigation on the coordination of  $\text{Na}^+, \text{K}^+, \text{Cl}^-$ , and  $\text{Br}^-$  in aqueous solutions, Thesis, 1975.
4. M. N. Buszlajeva, O. Ja. Szamojlov, Zs. Sztrukt. himii. 2, 551, 1961.
5. R. Caminiti, G. Licheri, G. Piccaluga, G. Pirra, Annali di Chimica. 65, 695, 1975.
6. D. T. Cromer, J. T. Waber, Acta Cryst. A25, 712, 1965.
7. C. Dejak, G. Licheri, G. Piccaluga, Gazz. Chim. Ital. 101, 159, 1971.
8. D. Eisenberg, W. Kauzmann, The structure and Properties of Water, Oxford, Clarendon Press, 1969.
9. Erdy-Gruz T., Transzportfolyamatok vizes oldatokban, Akadémiai Kiadó, 1971.
10. A. J. Freeman, R. E. Watson, Acta Cryst. 15, 682, 1962.
11. A. Guinier, Théorie et technique de la radiocristallographie, Dunod, 1964.
12. F. Hajdu, Acta Cryst. A27, 73, 1971.
13. F. Hajdu, Acta Cryst. A28, 250, 1972.
14. F. Hajdu, Magy. Kém. Folyóirat, 82, 346, 1976.
15. F. Hajdu, S. Lengyel, G. Pálkás, J. Appl. Cryst. 9, 134, 1976.
16. F. Hajdu, G. Pálkás, J. Appl. Cryst. 5, 395, 1972.



17. Hajdu F., Pálincás G., Hernádi J., szolgálati találmány, 163906. sz. magyar szab., 1971.
18. F. Hajdu, T. Radnai, J. Appl. Cryst. 8, 488, 1975.
19. K. Heinzinger, P. C. Vogel, Z. Naturforsch. 29a, 1164, 1974.
20. International Tables for X-Ray Crystallography, Vol. III., Birmingham, 1962.
21. P. Sz. Jasztremszkij, O. Ja. Szamojlov, Zs. sztrukt. himii, 4, 844, 1963.
22. Kálmán E., Pálincás G., Kémiai Közlemények, 45, 391, 1976.
23. J. Krogh-Moe, Acta Cryst. 15, 682, 1962.
24. R. M. Lawrence, R. F. Kruh, J. Chem. Phys. 47, 4758, 1967.
25. G. Licheri, G. Piccaluga, G. Pinna, J. Appl. Cryst. 6, 392, 1973.
26. G. Licheri, G. Piccaluga, G. Pinna, Chem. Phys. Lett. 35, 119, 1975.
27. G. Licheri, G. Piccaluga, G. Pinna, J. Chem. Phys. 64, 2437, 1976.
28. E. R. Malinowsky, P. S. Knapp, J. Chem. Phys. 45, 4274, 1966.
29. A. H. Narten, F. Vaslow, H. A. Levy, J. Chem. Phys. 58, 5017, 1973.
30. J. A. Nelder, R. Mead, The Computer Journal, 7, 308, 1965.
31. N. Norman, Acta Cryst. 10, 370, 1957.
32. G. Pálincás, T. Radnai, Acta Cryst. A32, 666, 1967.
33. A. Papoulis, The Fourier Integral and its Applications, Mc Graw-Hill, 1962.
34. G. J. Pings, J. Waser, J. Chem. Phys. 48, 3016, 1968.
35. T. Radnai, F. Hajdu, G. Pálincás, X-Ray Diffraction Studies of Aqueous Alkali Chloride Solutions, VIII. Hung. Diffraction Conference, 1976.
36. T. Radnai, G. Pálincás, F. Hajdu, A Solution of the Convolution Problem Emerging in the X-Ray Studies of Heteroatomic Liquids, X. Intern. Congress of Crystallography, Acta Cryst. A31S, 158, 1975.
37. Ch. H. Reinsch, Numerische Math. 10, 177, 1967.
38. A. F. Szkrisevskij, Rentgenografija zsidkosztyej, Kijev, 1966.
39. Szpravocnyik himika, I. 381, Moszkva, 1966.
40. C. Tavad, D. Nicolas, M. Rouault, J. Chim. Phys. 64, 540, 1967.
41. D. Sz. Tyerehova, I. V. Radcsenko, Zs. sztrukt. himii, 10, 1102, 1969.
42. D. Sz. Tyerehova, A. I. Rissz, I. V. Radcsenko, Zs. sztrukt. himii, 10, 923, 1969.
43. B. E. Warren, H. Krutter, O. Morningstar, J. Amer. Ceram. Soc. 19, 202, 1963.
44. J. Waser, V. Schomaker, Rev. Mod. Phys. 25, 671, 1953.
45. D. L. Wertz, R. F. Kruh, J. Chem. Phys. 50, 4313, 1969.

# A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEMIA AKUSZTIKAI MÉRŐHELYISÉGEINEK MŰSZAKI ADATAI\*

TARNÓCZY TAMÁS  
MTA Akusztikai Kutatólaboratórium

A korszerű akusztikai mérésekhez nélkülözhetetlen a jó minőségű „süket szoba” és „zengő szoba”. Az 1976-ban elkészült mérőhelyiségek gondos ellenőrző mérései részben igazolták az előzetes tervek teljesítését, részben érdekes új problémákra világítottak rá, amelyeket az eddigi mérés-technikában nem, vagy alig vettek figyelembe. Az ezzel kapcsolatos tapasztalatainkat és eredményeinket foglalja össze a közlemény.

## Bevezetés

Az akusztikai kutatás két legfontosabb laboratóriuma a „süket szoba” és a „zengő szoba”. Az előbbi teljesen visszhangmentes tér, a szabad hangtér körülményeit valósítja meg. A második hosszú utózengési idejű zárt tér, amelyben állandósult állapotban is, és a lecsengés folyamán is térbelileg egyenletes energiaeloszlású „diffúz” hangtér uralkodik.

A süket szobában végezzük el a legtöbb pszichoakusztikai kísérletet, a hallásküszöb meghatározásától és az irányhallástól az érthetőségi vizsgálatokig és a beszédhangok kutatásáig. Ugyanitt kell megvizsgálni a mikrofon alapérzékenységet, a hangszóró frekvencia- és irányjelleggörbéjét és egyes zajforrások hangteljesítményét.

A zengő szoba kiválóan alkalmas hangelnyelő anyagok vizsgálatára, valamint az embert és a hangszereket is beleértve, mindennemű hangforrás hangteljesítményének és dinamikájának megállapítására. A hangelnyelés-mérések kiegészítő vizsgálati módszere a Kundt-csőves (állóhullámos vagy impulzus módszeres) eljárás. Különböző anyagok hangenergia elnyelését mérhetjük benne, állandó beesési szög mellett.

A Magyar Tudományos Akadémia Akusztikai Kutatólaboratóriuma 1976–77-ben elkészült új mérőhelyiségei az előbbiekhöz hasonló mérési programokat hivatottak szolgálni. A mérőhelyiségek „hitelesítése” által ismeretessé válnak a bennük végzett mérések pontossága és korlátai, valamint módunk nyílik a más helyeken végzett mérések eredményeivel való összehasonlításra. Az eredmények közreadása azért is indokolt, mert a mérőhelyiségek jelenleg az országban a legpontosabb akusztikai méréseket teszik lehetővé.

Rövid áttekintésben a következő mérések és vizsgálatok elvégzésére van lehetőségünk (nem teljes a felsorolás):

- hallásküszöb görbék meghatározása szabad térben és fülhallgatóval,
- időszaki és maradandó hallásveszteség mérése,
- halláspszichológiai mérések (hangmagasság, hangosság, irányhallás, térhallás stb.),

\* Érkezett 1979. jún. 10.



- zenei akusztikai vizsgálatok,
- érthetőségi vizsgálatok,
- mikrofonok hitelesítése (összes adat),
- hangnyomásmérők hitelesítése,
- hangforrások vizsgálata (összes adat),
- térsugárzó (sztereofon, ambiofon, kvadrfon stb.) rendszerek vizsgálata,
- hangterjedési vizsgálatok,
- teremakusztikai mérések (közvetlen-zengő hang, energiaegyensúlyi felület stb.),
- hangteljesítmény mérése (szabad- és zengő térben),
- hangelnyelés mérések zengő térben,
- hangelnyelés mérések impulzus módszerrel (merőleges és ferde beesés mellett),
- rezonátorok elnyelő és visszatápláló hatásának vizsgálata.

### Általános ismertetés

A két fő mérőhelyiség ún. „ház a házban” elv alapján épült, vagyis merev összeköttetéssel, sehol sem csatlakozik az épület alapjához vagy vázához. A helyiségek egymástól is teljesen függetlenek, külön-külön használhatók. Fűtésük és szellőzésük nincs, egyetlen nyílásuk a kettős bejárati ajtó. Ezáltal hangszigetelési szempontból a helyzet kedvezőbb, mint a szokásos megoldásoknál.

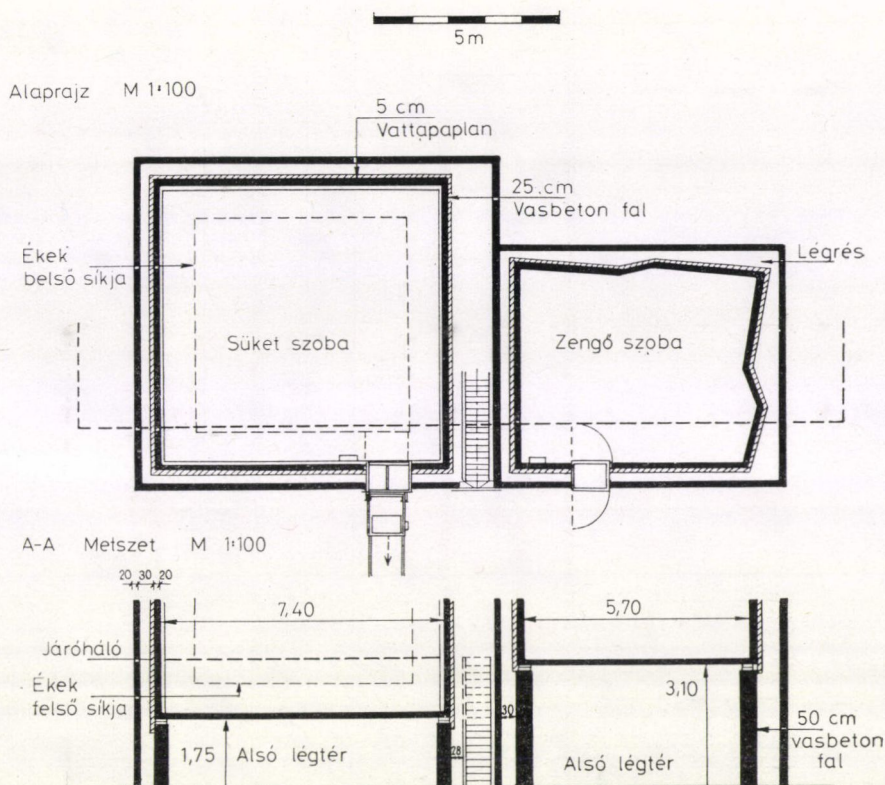
Az 1. ábrán közöljük az áttekintő alap- és metszetrajzot. Mindkét helyiség nyers építészeti munkáit (a helyiségek betontömbjeit) hazai kivitelező vállalat végezte, míg a rugózatot, ajtókat, kapcsolótábla kereteket és akusztikai átvezetéseket a *Grünzweig* és *Hartmann* (Ludwigshafen, NSZK) cég szállította és szerelte. A belső kiképzést a süket szobában szintén a német cég oldotta meg, míg ugyanezt a zengő szobában saját művezetésünkkel a hazai kivitelező vállalta. A gyenge áramú kábelezést magunk terveztük és készítettük.

A két mérőhelyiség mellett harmadik mérőrendszerként saját erőből egy függőleges mérőcsövet (Kundt-féle cső) is készítettünk. Ez 5,38 m magas és  $0,65 \times 0,65 \text{ m}^2$  keresztmetszetű téglafalú cső, amely alul  $0,70 \times 0,50 \text{ m}^2$  felületű vas ajtóval egy kis méretű vizsgálószobába nyílik. A cső felső vége az egyik emeleti laboratóriumi helyiségben van. Itt történik a gerjesztés és a mérési eredmények értékelése. A klaszszikus állóhullámú mérések mellett a csőben impulzus visszaverődéses kísérleteket is fogunk végezni. Az erre szolgáló mérőrendszer még nyers állapotban van, mert a működésbe helyezéshez szükséges elektronika tervezés alatt áll. Az eredmények értékelésére számítógépes eljárást vettünk tervbe.

A süket szoba meglehetősen nehéz belső építési munkáit két német szerelő 2–3 hónap leforgása alatt végezte el, s így ez a helyiség 1976 márciusában már készen állt. A jóval kisebb nehézséget jelentő zengő szobai kiképzés befejezése a hazai vállalat ilyen irányú tapasztalat hiánya miatt csaknem két év késéssel valósult meg.

A süket szoba rendeltetése, hogy belsejében a szabad hangterjedésnek megfelelő akusztikai állapot jöjjön létre. A zengő szobában éppen ellenkezőleg, teljesen diffúz, homogén hangtérnek kell létrejönnie. Emellett külső zavaró jeleknek sem légi, sem szilárd kapcsolatú úton nem szabad a terekbe behatolniuk. Természetesen mindhárom követelmény csak bizonyos határon belül teljesíthető. Éppen ezt kellett az elkészült helyiségekben ellenőrizni, ill. a finom beszabályozás során megvalósítani.



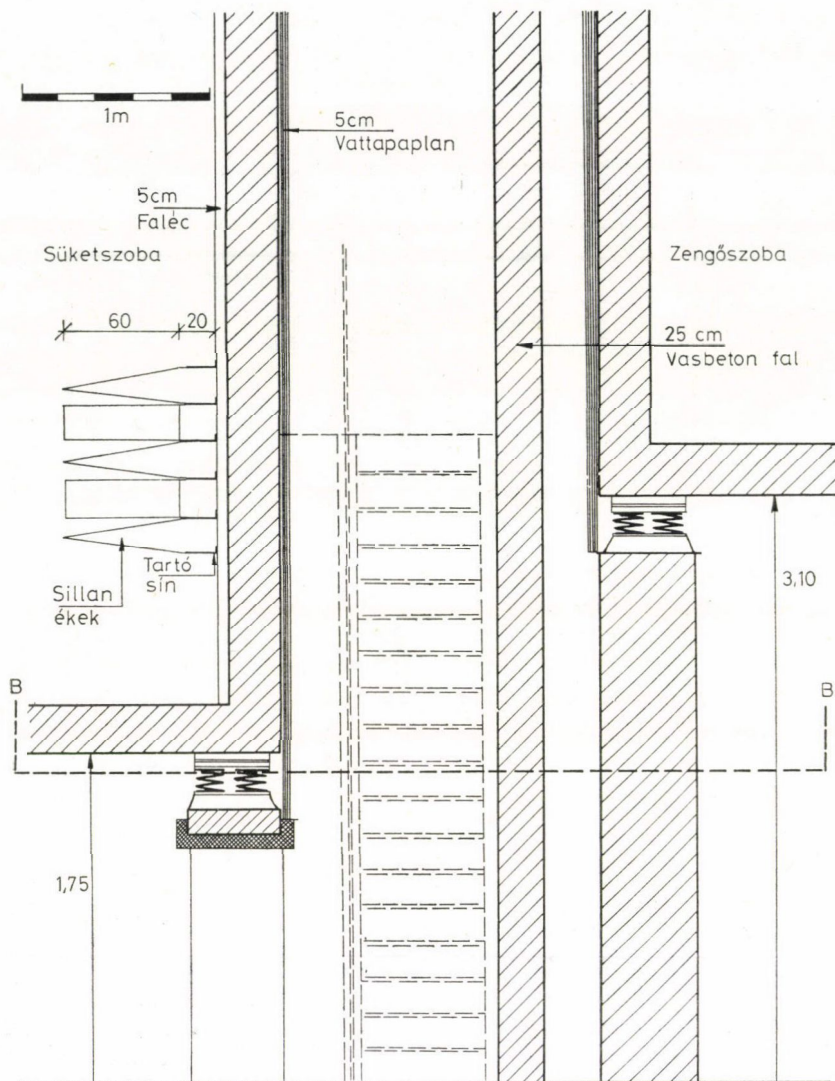


1. ábra. A süket és zengő szoba elhelyezésének alap- és metszetrajza

A mérések megkívánták a geometriai és statikai részletek teljes ismeretét is. Sajnos, a számunkra hozzáférhető építészeti dokumentáció ebből a szempontból hiányos volt, és néhány adatot (pl. a falak és födémek pontos vastagságát, a vasméret adatait, a vasak egymáshoz kötését) már nem lehetett megbízhatóan megállapítani. Utólagos mérések szerint a betonfalak vastagsága 20...24 cm, a födémeké 26...28 cm között változik. Mivel az építészek akusztikai tervezésben járatlanok, és sem a részletek kidolgozásában, sem a művezetésben nem kérték ki tanácsunkat, az építés során több szempontból is nehezen helyrehozható hibák keletkeztek. Ezeknek föltárását és közreadását is feladatunknak tekintettük, hogy hasonló hibák később elkerülhetők legyenek.

A két fő vizsgálóhelyiség egy minden oldalról főfalakkal határolt, mintegy 120 m<sup>2</sup> alapterületű zárt térbe van beépítve. A zárt tér falai az alapra támaszkodnak, fölül hanggátoló födém van. Ebben a térben a két mérőhelyiség külön-külön épített betonkoszorún nyugszik, úgy, hogy a süket szoba alatt 1,75 m, a zengő szoba alatt pedig 3,1 m belmagasságú tér található (2. ábra). A zengő szoba betonkoszorú alapja tehát jóval magasabb. Ezáltal érhető el, hogy a két helyiségbe közös folyosóról, azonos szinten lehet bejutni és anyagot bevinni. A zengő szoba alatti tér a külső

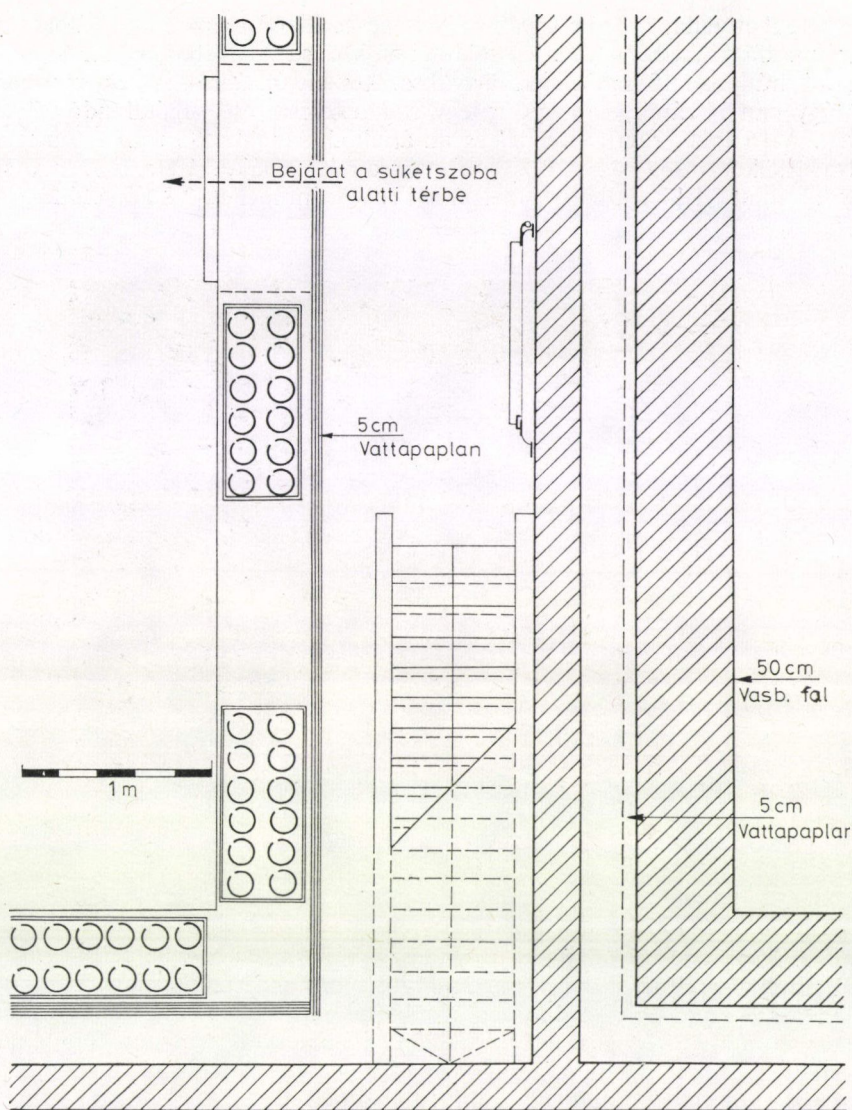




2. ábra. Szerkezeti metszetrajz a süket és zengő szoba között, a süket szoba alatti térbe vezető bejárat helyén metszve

falakba épített ajtók révén belülről (az elválasztó fal felől) és kívülről (az intézet alagsora felé) zárható hanggátló ajtóval van ellátva, ezáltal raktárnak is használható.

A vizsgálóhelyiségek nem közvetlenül nyugszanak a betonkoszorúkon, hanem rugós rendszerrel vannak alátámasztva. A süket szoba alá 16, a zengő alá 8 rugótelep került, amelyek a 195 tonna, ill. 108 tonna súlyú helyiségeket hordozzák. A külső falak és a vizsgálóhelyiségek fala között mintegy 30 cm széles légtér van és a két szobát egymástól még egy külön szerkezeti fal is elválasztja, mint az a 3. ábrából



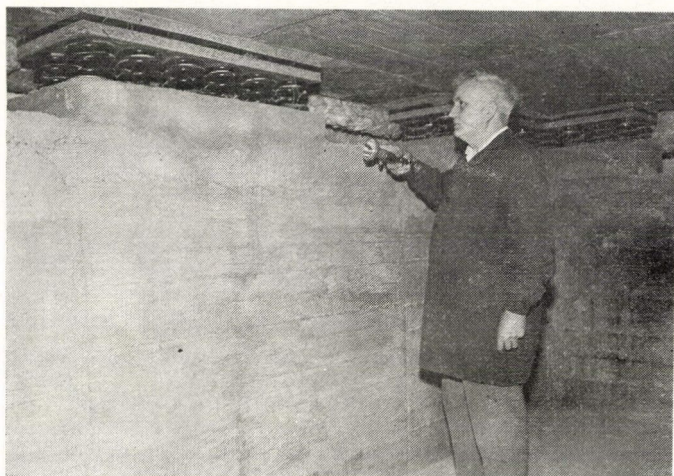
3. ábra. Szerkezeti alaprajz a rugók elhelyezésének szemléltetésére.  
A 2. ábra B—B metszete

látható. A légtér a süketszoba és a fal között 1,15 m széles és itt van a lejáró lépcső a két vizsgálóhelyiség alatti térrészbe. A lépcső csak az épületszerkezethez csatlakozik. A vizsgálóhelyiségek fölött is légtér van, tehát mindkét tömb csak rugókon keresztül van kapcsolatban az épület vázával.

Egy-egy rugótelep  $40 \times 100 \text{ cm}^2$  alap- és fedőlemez között elhelyezett 12 tekercsrugó (a rugó terheletlen magassága 162 mm, vastagsága 20 mm). A fedőlemez és



a terhelő betonalap között további 3-réteges csillapító lemezsor található parafa-gumi-parafa kivitelben. A rezgéscsillapítás fokozása érdekében a gumilapon a keskenyebb irányban 10 mm átmérőjű lyuksor készült (4. ábra). Az egész rugós rendszer úgy van kiszámítva, hogy egy-egy rugótekercsre eső rugóállandó 3750 kp/cm legyen. A 16 db 12 rugós teleppel és az általunk becsült 195 tonna tömeggel számolva a süket szoba tömeg-rugó rezonanciafrekvenciája 3,1 Hz. A zengő szobára nagyobb mint félekkora teher és feleannyi rugószám mellett 2,8 Hz adódik.

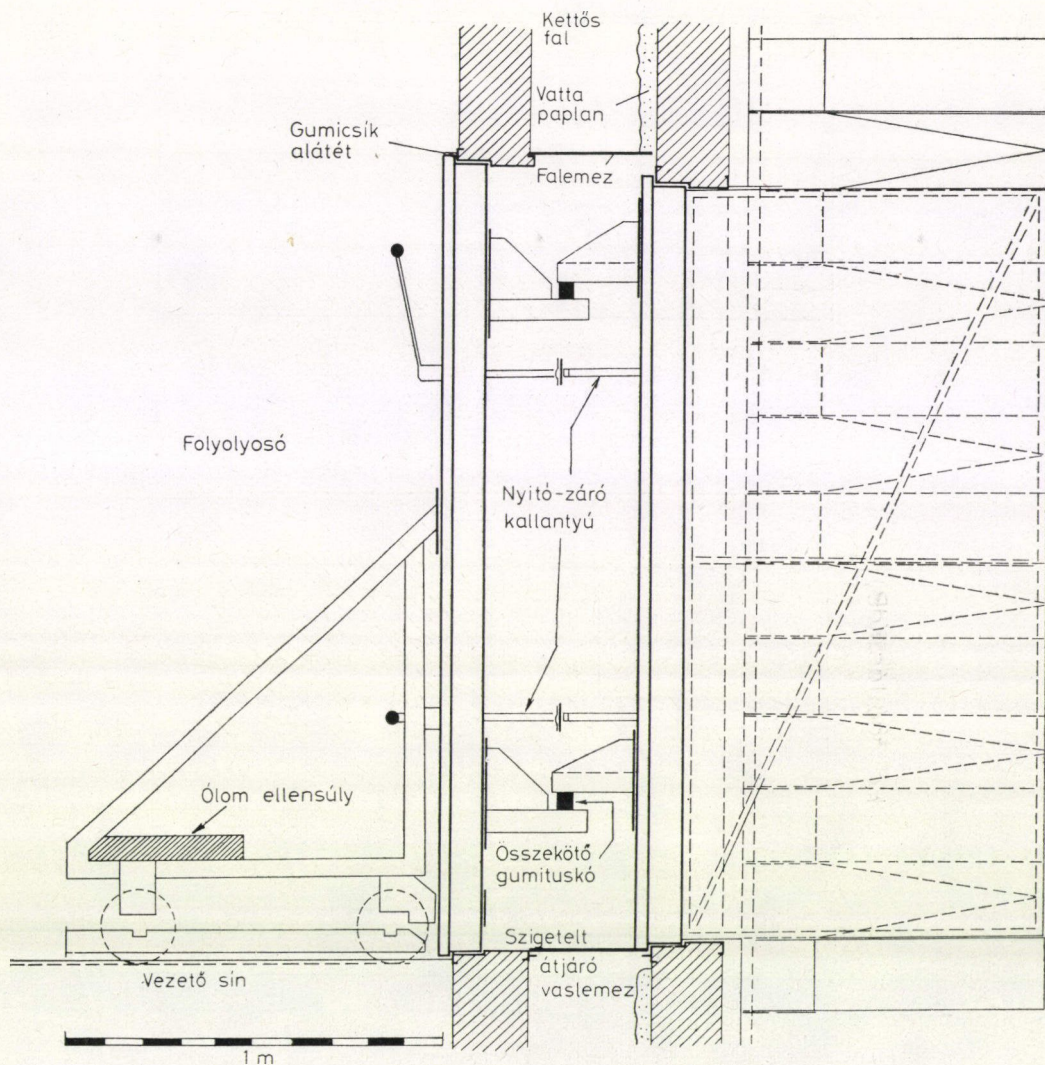


4. ábra. A süket szoba alatti tér egyik sarka, a rugótelepek elhelyezésének szemléltetésével (MTI felvétel)

Méréseink szerint az alapérték valójában 2,1 Hz, ami arra vall, hogy összenyomott állapotban (kb. 137 mm, ill. 130 mm) a rugóállandó kisebb a megadottnál. Sajnos, éppen a bizonytalan betonvastagságok miatt elképzelhető, hogy a terhelés az általunk becsültnél is nagyobb. Különösen a zengő szoba alatti rugók vannak erősen összenyomva. A szállító cég a számításait +20 százalék ráhagyással 20 cm vastag betonfalakra végezte el, ezt viszont a kivitelezők nem mindenütt tartották be. Még egy hibát észleltünk a rugótelepek elhelyezésében. Nem mindegyik tökéletesen vízszintes, s így a rugók egyenlőtlenül vannak terhelve.

Az általános leírásba kívánczik a bejárati ajtókeretek behelyezésének kérdése is. Két külön acélkeret van a külső, ill. a belső falba erősítve. Az  $1 \times 2 \text{ m}^2$  nagyságú ajtók között tehát nincs szilárd hangátvezető kapcsolat. A falak közötti 30 cm légtérbe még 5—8 cm vastag hangcsillapító paplanok is vannak függesztve (az ajtók helyén természetesen kivágva). A légteret áthidaló küszöblemezek alá gumiszalag csíkok kerültek, az oldalsó borítólemezek pedig csak a külső falhoz vannak erősítve, másik szélük lebeg. A zengő szobához ez a rendszer megfelelő hanggátlást biztosít, a süket szoba lezárása a szokásos különleges tolóajtó szerkezettel van megoldva. A szerkezetre némi felvilágosítással szolgál az 5. ábra.



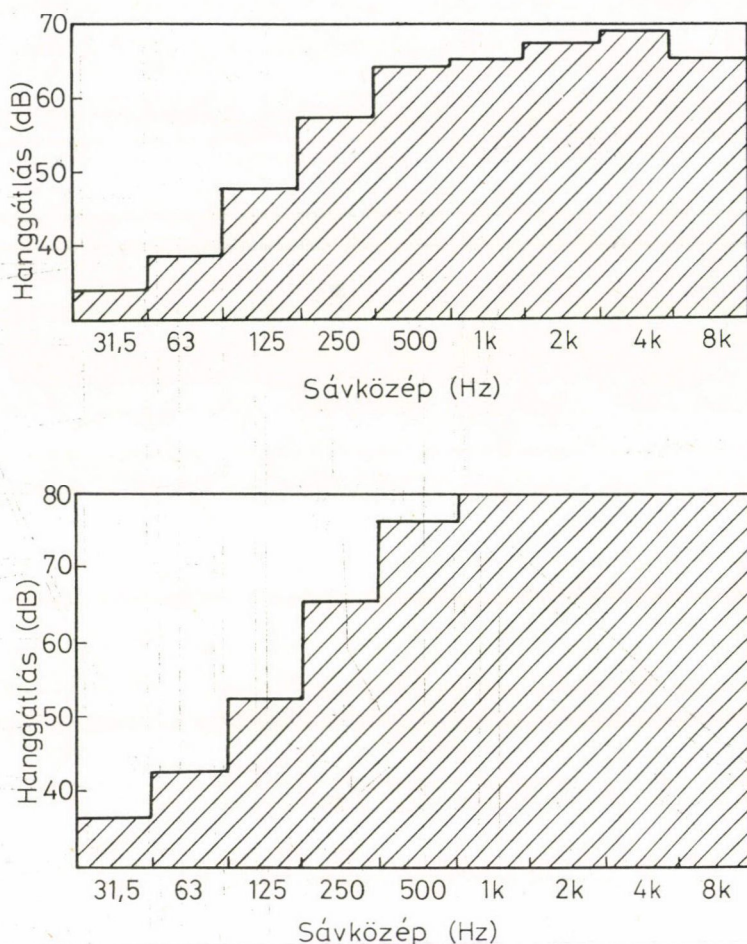


5. ábra. A süket szoba betolható kettős ajtajának szerkezeti vázlata.  
A belső ajtó és a ráerősített ékek minden külső elemtől szigeteltek.

### Hang- és rezgésátvezetés

A zengő szoba a hangszigetelés szempontjából egyszerűbb követelményeket tartalmaz. A léghangos átvezetést a kettős acélajtón keresztül, szabványos módon [1] oktávsávokban vizsgálva, a hanggátlásra a 6. ábra adatait nyertük (mikrofon 1 m-re az ajtófelülettől kívül, belül). A szállító cég 46 dB „átlagos” hanggátlást szavatolt. A valóságos mérési eredmény bármilyen számítási eljárással kapott „átlagos”





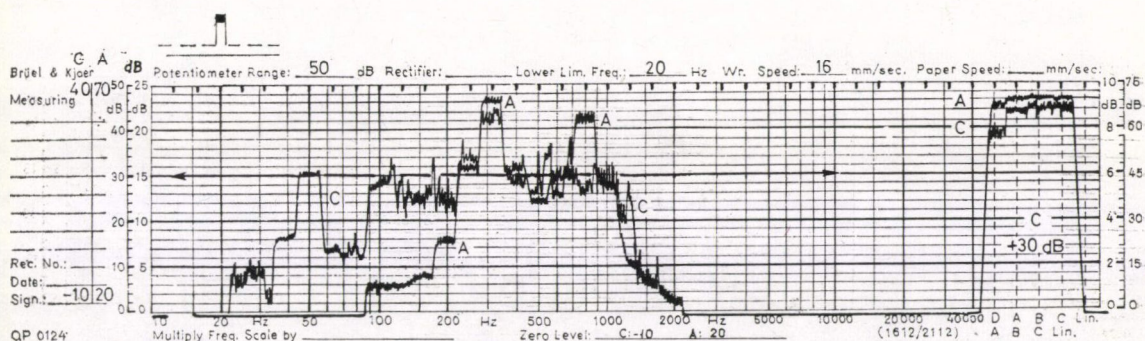
6. ábra. Hanggátlási adatok oktávsávokban a zengő szoba ajtajánál mérve

hanggátlása ennél az értéknél sokkal nagyobb. Viszont egyszeres ajtózárással az értékek 20...30 dB-lel esnek. Ezért mérések alatt gondosan be kell zárni mindkét ajtót.

A süket szobában hasonló adat a jóval nagyobb hanggátlás miatt közvetlenül nehezen mérhető. Ha a külső hangforrás hangteljesítményét megfelelő módon növelni tudjuk, miközben a süket szobában mérünk, egyes frekvenciasávokban elérhető, hogy a beszűrődő hang a belső alapzaj fölé kerüljön. Mintegy 70 dB hanggátlási szám fölött azonban még így is reménytelen a hanggátlás mérése (7. ábra). Ez gyakorlatilag a mérőhelyiség teljes hangvédelmét jelenti. Észlelhető átvezetés a 31,5 Hz középfrekvenciájú oktávsávban és ez alatt jelentkezik.

A süket szoba hanggátlása azonban sokkal jobb az ajtónál, mint az alsó födém alatti térben. Maga az ajtó sínen tolható szerkezet (l. az 5. ábrát), amely két részből





7. ábra. Hanggátlási adatok oktávsávokban, a süket szoba ajtajánál mérve.  
A 80 dB-nél nagyobb értékek nem mérhetők

áll, és ezeket különleges, torziósan terhelt gumiszigeteléssel ellátott tartók fogják össze. A belső ajtólapra a belső kiképzésnek megfelelő ékrendszer van fölerősítve. A hanggátlás szokásos mérési tartományban kifogástalan, azonban 30 Hz alatt fokozatosan romlik. Első méréseink szerint az egész kis frekvenciájú nyomásingadozásokat a belső térben a mikrofon érzékenyen vette. Pl. ha kézzel kissé megnyomtuk a külső ajtólapot, a mikrofon a 2...20 Hz sávban az alapzajhoz képest 10...15 dB pillanatnyi hangnyomás növekedést jelzett [2].

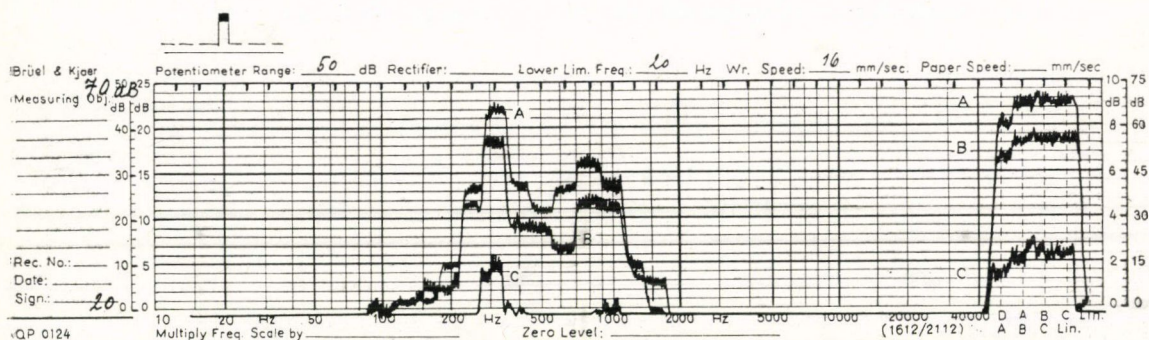
A rendkívül kis nyomásváltozás belső-téri megjelenése érdekes jelenség. Okát kutatva megállapítottuk, hogy az ajtólapok merevsége és belső csillapítása nem elégséges, a két ajtólap közötti zárt légtér rezonátorként viselkedik, végül a teljesen zárt belső térben nincs lehetőség a statikus nyomás gyors kiegyenlítődéseire. A jelenség egyébként 20 Hz—30 Hz tartományban már nem zavaró, mivel ott 60 dB különbség van a mérhető hangnyomásszint és a hallásküszöb szintje között. Azonban infrahangos mérések során mégis gondot okozhat, ezért néhány módosítást hajtottunk végre az ajtón. Ezek elsősorban a merevítéssel és az átvezetés csökkentésével kapcsolatosak. Egyúttal a két ajtó közötti zárt légtérrel is megszüntettük, amennyiben a falak között lezáró falemezeket megfelelő sűrűségű lyukfurattal láttuk el. A korábban tapasztalt jelenséget sikerült mintegy 15...20 dB-lel csökkenteni.

Az alsó födémek hanggátlásának vizsgálatára különös gondot fordítottunk. A többféle módszerrel is elvégzett mérések eredményei arra utalnak, hogy a süket szoba hatalmas alsó födémlemez, mint szélein befogott Chladni-féle lemez, rezgésbe jöhet. A rugókon átvezetett longitudinális rezgések gerjesztik a lemez hajlítási rezgéseit (6,2 Hz, 10 Hz, 12,5 Hz stb.), s ezek rezonanciás úton fölerősödnek [3]. Az alsó födémlemez nem elég merev, s csaknem 8 m élhosszúságú vasbeton lemeznek nincs elegendő vastagsága (24 cm), hogy a rezonanciát kellőképpen csillapítsa. Ez a hatás annyira jelentős, hogy a lemez a süket szoba alatti térben keltett lég-hangok hatására is lengésbe jöhet. Csökkentésére hangcsillapító anyagokat hordtunk az alsó térbe és egy közép-alátámasztást is tervbe vettünk.

A jelenség 50 Hz fölött a süket szobában természetesen nem mérhető, de pl. infrahang vizsgálatoknál ezt is figyelembe kell vennünk.

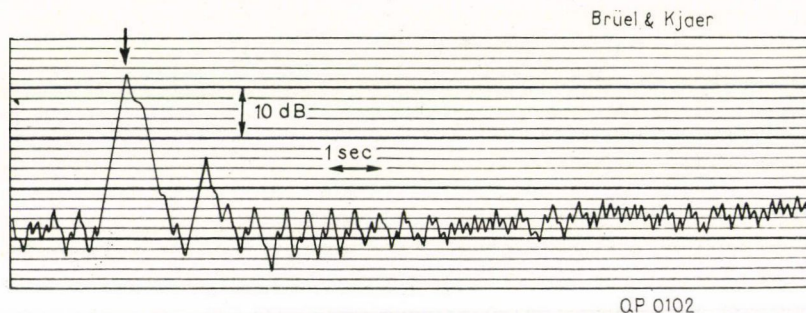
A rezgés átvezetési mérések a lég-hang átvezetésénél valamivel rosszabb adatokat eredményeztek. A rugók csillapítása kopogógépes mérésekkel átlagban 30...35 dB-





8. ábra. Kopogógéppel készített tercsávós gyorsulási szintek színeképei. A: a rugótelep talpán, B: a rugók fölötti lemezen és C: a parafa-gumi-parafa réteg fölött a földemen. A felső görbék azonos szintre vonatkoznak, az alsó görbéknél (csak A és C) a C szintet 30 dB-lel megemeltük. Átfogás 50 dB

nek adódott (8. ábra). Az átvitel 200 Hz alatt kezd jelentkezni. E fölötti frekvenciákon inkább a gumi véd, lefelé a rugó válik hatásosabbá. Elégg lecsökken a rezgésgátlás 50 Hz körül, majd 20 Hz-től lefelé több rezonancia is jelentkezik: a legalsó 2 Hz-nél van. Ütésgerjesztéssel ezt nagyon jól ki lehetett mutatni (9. ábra).



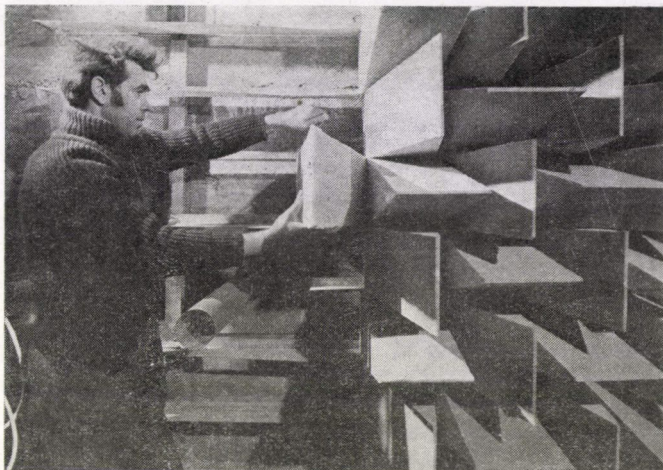
9. ábra. Ütésgerjesztéssel készített rezgési gyorsulási oszcillogram a süket szoba alsó földlemezen. A rezgési frekvenciák (2, 6 és 10 Hz körül) jól mérhetők, a csillapodás rendkívül lassú. A gerjesztés helye nyíllal jelölve

A rezgésvizsgálatokat általában igen erős gerjesztéssel végeztük. Az épületben valóságban 30...40 dB-lel kisebb az átlagos rezgésszint. Mégis, az épület előtt vezető közlekedési főútvonal és a valamivel távolabbi vasútvonal esetenként jelentős rezgési amplitúdókat hoz be az épületbe. A mélyhangú és infrahangú alapzaj tehát bizonyos fizikai méréseket zavarhat. Igen érzékeny rezgésmérések alkalmával az épületen belüli erősebb ajtóbecsukások is kimutathatók. Éppen ezért egyik leg-lényegesebb hitelesítő vizsgálatunknak a belső alapzaj mérését tekintettük.



### A süket szoba adatai

A szoba nyers hasáb építményének belső mérete  $7,4 \times 7,4 \times 6,1 \text{ m}^3$ . A falakra 1 m távközökben  $5 \times 5 \text{ cm}^2$  vastag fenyőfa gerendaszor van fölérősítve; erre építették rá a hangelnyelő Sillan (sajtolt és impregnált ásványgyapotszálú anyag) ékeket. A gerendákon a falra merőlegesen 20 cm széles lyukasztott fémszalagok futnak, s ezekbe vannak a  $20 \times 20 \text{ cm}^2$  alapterületű Sillan-ékek betolva, mindig egymáshoz képest  $90^\circ$ -kal elfordítva, mint ezt a 10. ábra szemlélteti. Az ábrán jól lát-



10. ábra. A Sillan-ékek behelyezése a süket szobába (MTI felvétel)

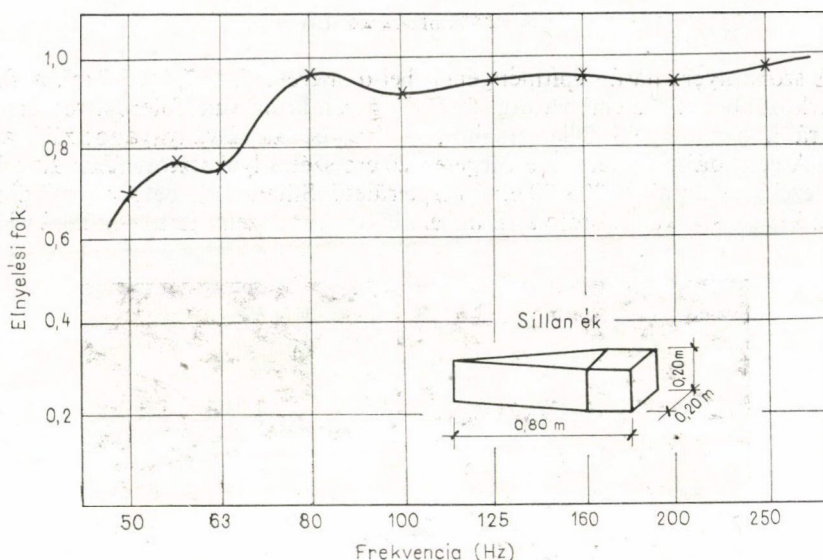
ható a tartó fémlemezzel azonos anyagból készült kábelbevezető cső is, amelynek kitűnő akusztikai elnyelése van, s így a hanggátlást még a kettős falon átvezetve sem rontja.

Az ékek mögötti 5 cm vastag légréteg a mély hangokra széles sávú csillapító rezonátorként működik. Az ékek elnyelési foka a cég saját adatai szerint 72 Hz fölött  $\alpha = 0,92 \dots 0,97$  (11. ábra). A felszerelt rendszerre csak számítás alapján lehet elnyelési értékeket megadni [4, 5, 6]. Az irodalomban közölt adatok a miénkhöz hasonló felszerelésre általában 112...125 Hz alsó határt állapítanak meg ( $\alpha = 0,99$ ). Hangterjedési méréseink (l. később) ezt a határt esetünkben 90...100 Hz között valószínűsítik. Méréseink „laboratóriumi” pontossága tehát 100 Hz fölött biztosított.

Ismeretese a Sillan-anyagra nemzetközi mérések, sőt magunk is mértük 5 cm vastag táblák elnyelését. A kész mérőhelyiségben az elnyelés az ékek elrendezése (a visszaverődések „befulladásza”) miatt a mért adatoknál nagyobb: közvetlenül mérhetetlen. A süket szoba falainak ilyen értelmű jóságát a szabadban való hangterjedés törvényeinek teljesítésével mérjük [7, 8, 9].

A süket szoba mind a hat határfelületén ékekkel borított. Az ékes borítás alapterülete  $218 \text{ m}^2$ , a tér belső geometriai érintő felülete  $163 \text{ m}^2$ . Azonban a helyiség összes hatékony elnyelő felülete éppen az ékes kiképzés miatt ez utóbbi érték hat-





11. ábra. A Sillan-ékek Kundt-féle csőben mért hangelnyelési görbéje mély hangokra az ábrán elzett ékadatok mellett

szorosa, vagyis kerek  $1000 \text{ m}^2$ . Pontos számolás ennél az értéknél valamivel többet mutat ki, de az ékek összeérő helyei közelében az akusztikai hatékony felület már nem növekszik a geometriai számítások arányában. A beszerelt ékek darabsúlya  $1,5 \dots 1,6 \text{ kg}$ . Az 5450 ék és az egyéb beépített szerelvény súlya a süket szobában  $10 \text{ tonna}$  fölött van.

A bejárati magasságban kifeszített huzalháló teszi lehetővé az alsó ékek fölötti járást és a műszerek elhelyezését (12. ábra). A járóháló  $3,2 \text{ mm}$  átmérőjű horganyzott acélsodronyokból készült négyzetes hálóban, a sodronyok egymástól  $6 \text{ cm}$ -re a betonba ágyazott feszítőkeretre vannak erősítve. A tervezők a feszítőkereten méteren-kint legalább  $3000 \text{ kg}$  terheléssel számoltak, a háló közepén kb.  $200\text{--}300 \text{ kg/m}^2$  terheléssel vehető igénybe. Az acélháló alatt sűrűszövésű műanyag háló lebeg, nehogy az alsó ékek közé behullhasson valami.

A nehezebb műszerek elhelyezésére az alsó födémre két helyen  $3\text{-}3$  vas lábat erősítettünk (l. a 12. ábrát). Ezekre csillapító anyaggal burkolt, háromszög alakú falapok erősíthetők műszerek vagy kísérleti személyek elhelyezésére.

A belső tér éktől-ékgig mérve  $143 \text{ m}^3$ , a teljes légtér, ami egyben a hatékony akusztikai tér:  $200 \text{ m}^3$ . Ez utóbbi az ékek geometriájából számítható ki. Az ékszerű falképzés megsokszorozza az elnyelés hatásfokát, hiszen a belső hangenergia legnagyobb része a rendszerben többszörös visszaverődést szenved. Könnyen ki-számítható, hogy a szoba  $5,7 \text{ m}$  hosszmeretéhez képest mintegy  $45 \dots 55 \text{ cm}$ -re szabad a  $18^\circ$ -os ékszögű ékeket a hangforrással, ill. a mikrofonnal megközelítenünk, ha a tér teljes akusztikai jóságát ki akarjuk használni. A háló is  $55 \text{ cm}$  magas van az alsó ékek fölött. Így végül egy harmadik téradatot is nyerünk, a precíziós mérőtér térfogatát: ez  $75 \text{ m}^3$ . A legnagyobb mérőtávolság síkátlóban  $6,6 \text{ m}$ , térátlóban  $7,4 \text{ m}$ .



### Alapzaj mérések

A süket szoba csendességében el kell érniünk a hangmérések abszolút alapszintjét, ami hangfrekvenciás tartományban  $2,10^{-5}$  Pa hangnyomásnak felel meg. A vizsgálatot igen nagy körültekintéssel végeztük el; erről külön ismertetést készítettünk [2]. Az előkísérletek során kiderült, hogy az akusztikai alapzaj mellett jelentős elektromos alapzaj is zavarja a méréseket.

Az aláphoz erősített vas tartó lábak, az elektromos világítás és az erősáramú kapcsolótábla a hálózathoz hoz be erős zavarokat. Ezt aránylag könnyű kiküszöbölni: az érzékeny mérésekhez teljes berendezéseket használunk. Ezen felül azonban zavart kelt a tervezési megfontolatlanságból a süket szobához igen közel elhelyezett transzformátorház is. A szórt elektromos zavarok jelentős szerepet kapnak még az Intézetben elhelyezett nagyteljesítményű gépek — különösen bekapcsoláskor vagy terhelés változtatáskor. Ezek ellen a zavarok ellen a járóháló, valamint a külső vattapaplant összefogó huzalháló földelésével próbálkoztunk védekezni, nem túl sok sikerrel.

Az elektromos zavarok módszeres kiküszöbölése után a helyzet mintegy 10...15 dB-lel javult. A készülékek zaját a kondenzátor mikrofon kapacitásával lezárt bemenet mellett mérve azt tapasztaltuk, hogy 2...20 Hz között már csak néhány csúcs található mintegy 7...8 dB-lel az abszolút 0-szint fölött. Egyébként a színek egyenletesen esik és 25 Hz fölött eléri a 0 dB értéket, majd 200 Hz fölött már csak -6...-7 dB-lel jelenik meg.

Hasonló vizsgálatot végeztünk az akusztikai alapzaj szintjének meghatározására is. A 13. ábrán a 20...200 Hz közötti tartomány keskenysávú színeképét mutatjuk be, fölül a berendezés által szolgáltatott elektromos zajra, alul — az egyébként azonos körülmények között, de mikrofonnal ellátott rendszer által mérhető — akusztikai alapzajra. A felvételek 3% relatív sávzélességű szűrőkörös elemzés eredményei. Látható, hogy az átlagos szint az akusztikai mérés során is 25 Hz fölött 0 dB alá kerül, kivéve egy 50 Hz-en jelentkező éles +8 dB maximumot, amely az elektromos alapzajban nem volt kimutatható. Erre az az elképzelésünk, hogy a közeli transzformátorház elektromos tere az egész süket szoba vasbeton vázát rázza, és így a zavar akusztikus formában jelentkezik. Ez a zavar kiküszöbölhetetlen, de semmiféle hallástani alpmérést nem zavar, hiszen a hallásküszöb görbe ezen a frekvencián 42 dB körül fut.

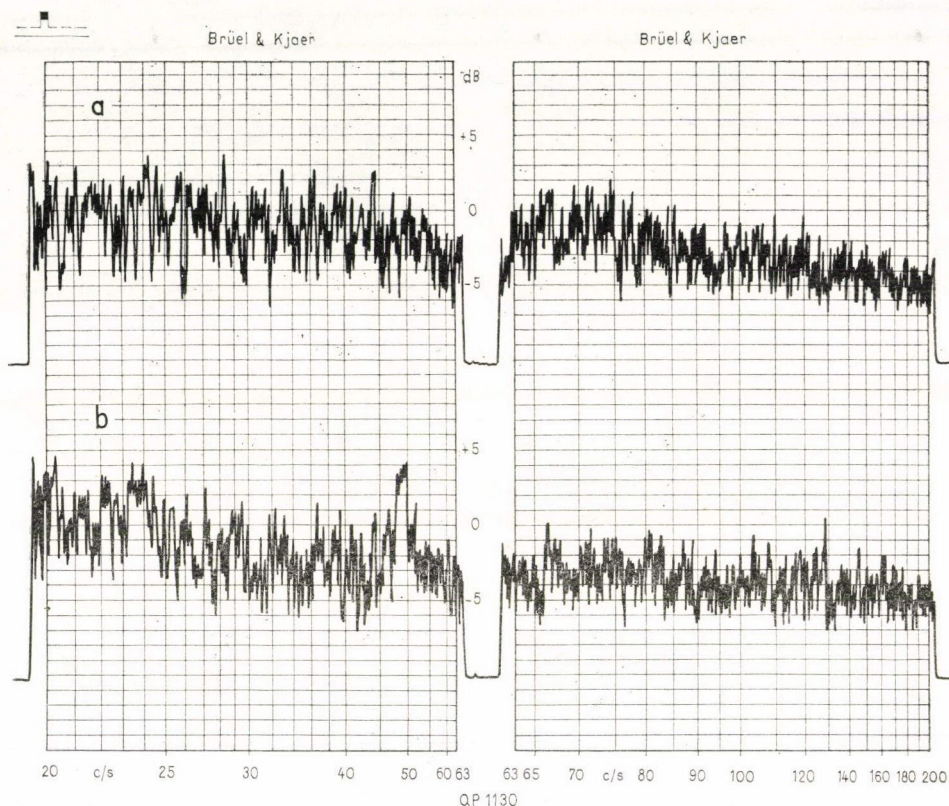
Mindkét mérést mennyezetre függesztett mikrofonnal végeztük, testhang



12. ábra. A süket szoba járóhálójának és földemhez erősített tartó rudak helyzetének szerelés közben (MTI felvétel)



fölvétele tehát kizárt volt. Ha a mikrofont a födémmel szilárd kapcsolatban álló állványokra állítjuk, a legalsó rezonanciák változatlanul jelentkeznek, 25 Hz és 50 Hz frekvencián a maximumok 6...10 dB-lel megemelkednek és a nagyobb frekvenciákon is általában 5 dB-lel magasabbá válik az alapzaj szintje. Ez a többlethatás a födémlemez már ismertetett belengésével magyarázható.

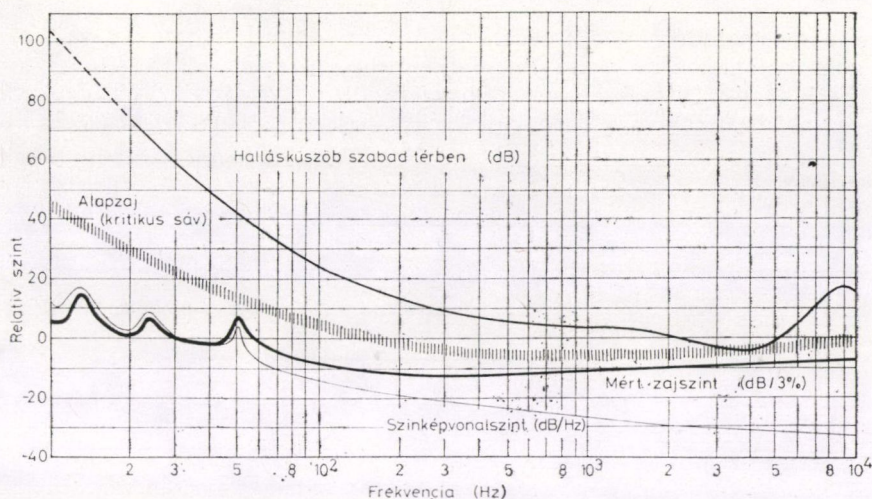


13. ábra. A süket szoba a) elektromos és b) akusztikai alapjának színeke 20 Hz és 200 Hz között, 3% sávzélességű szűrővel mérve, függesztett mikrofon esetén;  $0 \text{ dB} = 2 \cdot 10^{-5} \text{ Pa}$

Összesített eredményeinket a 14. ábrán tüntettük föl. Ezen látható a hallásküszöb görbe, az akusztikai alapzaj 3%-os sávzélességű színeke a legjobb mérési körülmények között, de nappali utcai forgalom és intézeti zavarok mellett, valamint a kritikus sávokra átszámított alapzaj szint. Ez utóbbi hasonlítható össze a hallásküszöbvel, tehát halláspszichológiai méréseknél ez a görbe mérvadó. Látható, hogy az alapzaj csak 4000 Hz környékén éri el az átlagos normális hallásküszöb görbét.

Fizikai mérésekhez, mint pl. a mikrofonok abszolút érzékenységének meghatározása, a mért zajszint görbét kell figyelembe vennünk. Ez 25 Hz fölött (az 50 Hz-en jelentkező zavarpont kivételével) mindenütt az abszolút 0 dB alatt helyez-





14. ábra. A süket szoba mértékadó alapzaj értékei különféle szempontok szerinti mérések esetére, összehasonlítva a szinuszos hangra vonatkozó normális hallásküszöb görbével

kedik el. Meg kell jegyeznünk, hogy 3% relatív sávzélesség kb. 30 Hz-nél éri el az 1 Hz abszolút sávzélességet. Nagyjából ez az alsó határ, ameddig ma megbízható szűrők készíthetők. Más szóval 25 Hz alatt az alapzaj már nem szorítható az akusztikai abszolút 0 dB szint alá.

### A szabadtéri hangterjedés

A süket szoba szabadtér-szerűségét a hangenergia terjedési törvényének ellenőrzésével mérjük. Szintértékekben kifejezve a távolság kettőzése 6 dB csökkenéssel kell, hogy együtt járjon. Az idevonatkozó irodalom nagyon hiányos a fölmerülő fizikai és technikai problémák ismertetésében, ezért a részletekre külön dolgozatban [10] térünk ki.

A süket szobában 4,5 m hosszú pályát készítettünk térátlós irányban. Rögzített hangforrás mellett a mikrofon egyenletes mozgatásával oldottuk meg a távolságfüggő energiacsökkenés önműködő föl vételét. A szabványos előírás úgy szól, hogy a süket szoba abban a térrészben és olyan frekvenciatartományban tekinthető precíziós mérésre alkalmasnak, amelyben a távolsági törvénytől való eltérés nem haladja meg a  $\pm 1$  dB-t. Éppen ezért nem alkalmaztuk a logaritmizálásának Rivin-féle pontosabb módszerét [11].

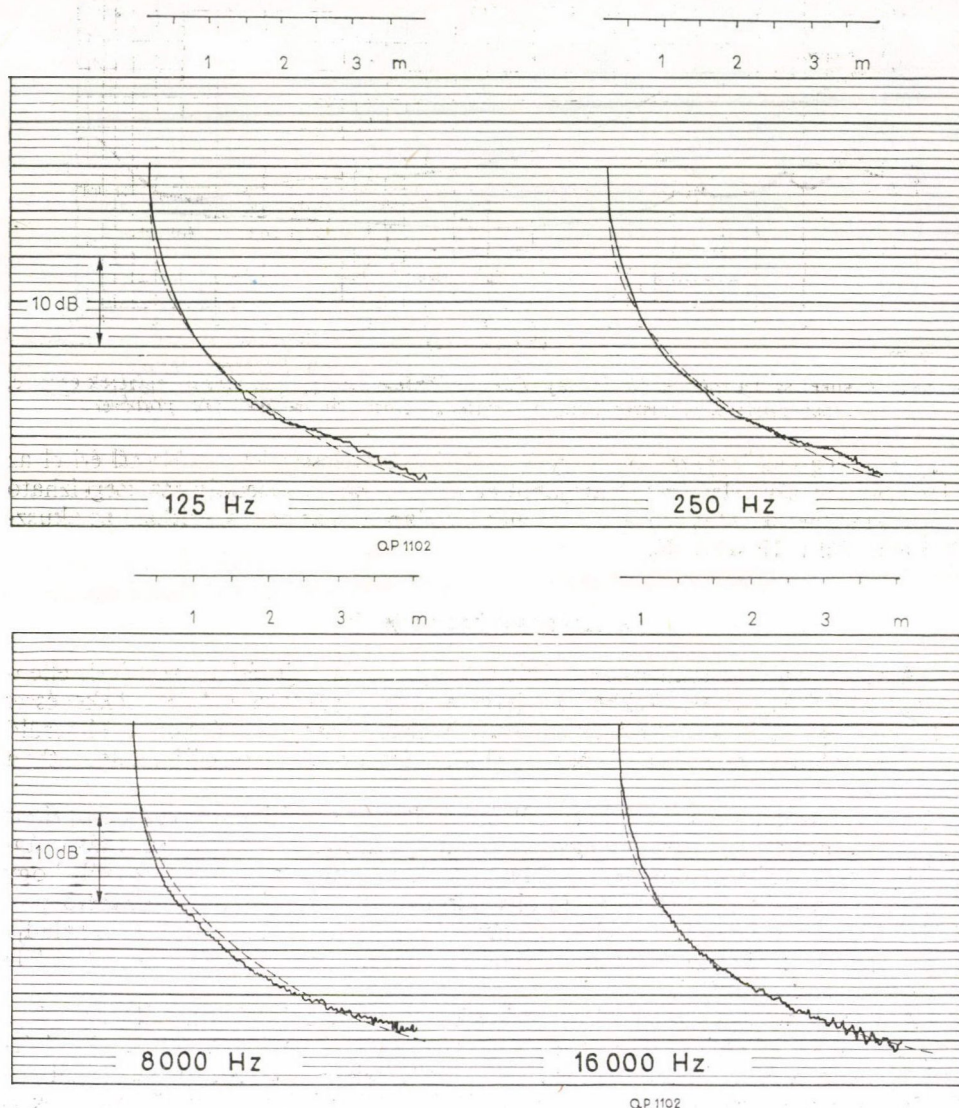
A mérési hibák és zavaró körülmények csökkentése érdekében először a legmegfelelőbb — lehetőleg pontszerű — hangforrás kiválasztására végeztünk kísérleteket, majd a mérőállvány okozta visszaverődéseket küszöböltük ki. Végül kiderült, hogy még egy néhány cm méretű kábelcsatlakozóról visszaverődő hangok is zavarták a teret.

A tapasztalatok a későbbi kísérletekben hasznosíthatók; az a lényegük, hogy a visszaverődéseket teljes mértékben nem lehet megszüntetni. Ahelyett, hogy ezzel próbálkoznánk, helyesebb elnyelő táblákkal megfelelőképpen a határoló ékek felé



terelni a megmaradó visszaverődéseket. Az ékek elnyelési hatásossága ugyanis jóval nagyobb mindenféle borító vagy burkoló elnyelő anyagénál.

Ennek az újszerű megoldásnak a magyarázata egyszerű. A mély hangok elhajlanak az akadályokon és gömbhullámszerűen terjednek. Ezért ezek visszaverődés



15. ábra. A négyzetes távolságcsökkenő törvénytől való eltérés a süket szobában 125 Hz, 250 Hz, 8000 Hz és 16 000 Hz frekvencián. A pontos négyzetes törvény szaggatott vonallal, a mérési eredmény kihúzott vonallal jelölve. Az 500 ... 4000 Hz tartományban az eltérés a kétféle görbemenet között ábrázolhatatlanul kicsi; 1 függőleges osztás = 1 dB. A távolságok az ábrák fölött önműködő jelöléssel (1 osztás 0,5 m)



szempontjából nem veszélyesek. A magas hangok viszont jól irányíthatók. Ha valamilyen tárgyon zavaró visszaverődés keletkezik, a hangforrás és a tárgy közé hiába helyezünk elnyelő anyagot, bizonyos mértékű visszaverődés tapasztalható. Ha azonban ezt az energiahányadot a határfelületek felé tereljük, az ékek a hangenergiát befogják.

Az ilyen módon előkészített süket szobai térben végeztük el a hangterjedés kísérleti vizsgálatait. A 15. ábrán mutatjuk be az energiacsökkenés kísérleti eredményeit a legrosszabb esetekre. A tér 4 m távolságon belül minden frekvencián eleget tesz a  $\pm 1$  dB tűrési értéknek. Ezen belül azonban bőven van olyan térrész és olyan frekvenciatartomány (500...4000 Hz), ahol  $\pm 0,5$  dB pontossággal (ez maga a mérési pontosság) megvalósul a szabad hangtér. A szállító cég az ékhosszúság alapján 90 Hz-től szavatolta a tér használhatóságát. Méréseink szerint ez az érték 90...100 Hz között van.

### A zengő szoba adatai

A belső nyers méretek  $5,7 \times 4,9 \times 4,6 \sim 131 \text{ m}^3$ , a határoló felület  $155 \text{ m}^2$ . Két oldalfal és a mennyezet törtvonalú, hogy a magas hangokra ne keletkezhessenek állóhullámok (ugyanaz a fogás mély hangokra nem elég hatékony). A mozaikkő padlón kívül minden felület cementtel simított műkő, amit két réteg kemény zománcfestéssel vontunk be. A mennyezeten és a falakon összesen 310 vaskampó van a betonba bekötve (a betonacélokhöz erősítve), különféle vizsgálatok és anyagelhelyezés céljára.

Minthogy a hangenergia eloszlásának térben és időben egyenletesnek kell lennie, a helyiségben a hang szétszórására szolgáló gömb alakú „diffuzorokat” helyeztünk be (16. ábra). Elsősorban többféle átmérőjű (1 m, 0,6 m és 0,3 m), merev anyagú és nagyon jó hangvisszaverő felületű gömböket használtunk. Felületüket a falaknál is bevált kemény zománcfestéssel festettük be. A diffúzió fokozása érdekében a teret két, sarokban elhelyezett hangszóróval gerjesztjük.

A diffúz hangtér kialakulása csak bizonyos frekvenciák fölött várható. A nemzetközi szabványelőírások [12] szerinti határfrekvencia  $180 \text{ m}^3$  térfogatú helyiségben 125 Hz, egyébként

$$f_h = 125 \sqrt[3]{\frac{180}{V}} \text{ Hz},$$

ahol  $V$  a kérdéses tér köbtartalma. A  $131 \text{ m}^3$  térfogatú mérőszobánkban még összesen  $2 \text{ m}^3$  diffuzor, hangszóró, kapcsolótábla is van, ezzel a szabványos határfrekvencia 141 Hz. Valójában diffuzoraink jobbakként a szokásosan használtaknál.



16. ábra. Előkészület a zengő szobában végzendő hangelnyelés méréshez. A befüggesztett elnyelő táblák mögött két diffuzor látszik (MTI felvétel)



Méréseink szerint 100 Hz-en  $\pm 2,5$  dB, 125 és 160 Hz-en  $\pm 2$  dB, 200 és 250 Hz-en  $\pm 1,5$  dB, onnan fölfelé ennél is jobb a négyzetes eltérés értéke, azaz mindenütt a szabványos határérték alatt marad [13]. Ezért 100 Hz fölött megbízható eredményekre számíthatunk.

A 315 Hz fölötti tartományban a tér egyenletessége már  $\pm 1$  dB-en belüli. Az ingadozások mértéke azonban függ a választott mérési eljárástól [14]. A legegyszerűsebb teret fehér zajos gerjesztéssel és mérőoldali terc-szűrővel nyerjük. Az ellenőrző mérésekhez 1,5 m sugarú körön forgó mikrofonos letapogatást használtunk.

A falak és a visszaverő felületek közelében a visszaverődések megnövelik a hangnyomást, ezért ezektől a felületektől a vizsgált hullámhossz negyedénél távolabb kell mérni. Ezáltal terünk használható része (a diffuzorok környékét is leszámítva) 100 Hz-en való méréskor  $34 \text{ m}^3$ , de 200 Hz-en már  $72 \text{ m}^3$ . Korlátozza a mérőtér nagyságát a hangforrás környezetének kizárása is. Ez azonban jelentéktelen és az előbbi hatásnak — frekvencia szempontjából — ellene dolgozik. Pontszerű hangforrás esetén ugyanis a kizárandó távolság

$$l = 0,18 \sqrt{\frac{V}{T}} = 0,45 \sqrt{F\bar{\alpha}} \text{ m,}$$

ahol  $T$  a kérdéses frekvenciasávban a terem utózengési ideje,  $F\bar{\alpha}$  az összes visszaverő felület és az átlagos elnyelési fok szorzata.

Ez a korlátozás a nagyobb frekvenciák irányában válik jelentőssé. Esetünkben 8000 Hz környékén  $l=2 \text{ m}$  a hangforrások körüli tiltott térrész sugara. Ezen a frekvencián viszont a határfelületek akár 2 cm-re is megközelíthetők, vagyis csaknem a teljes belső tér alkalmas a mérésre. A diffuzitás számszerű meghatározása zengő szobában éppen olyan nehéz méréstechnikai feladat, mint az elnyelési foké sűket szobában. A tér letapogatása csak a statisztikai eloszlás meghatározásában nyújt segítséget. Viszont már korán igyekeztek nemzetközi körmérésekkel tisztázni, hogy milyen tulajdonságú helyiségek szolgáltatják a legjobban egyező eredményeket például elnyelési adatokra vagy hangteljesítmény mérésekre [15, 16, 17].

Ezekből a mérési sorozatokból az is kiderült, hogy a terem köbtartalma sokkal kevésbé jelentős a pontos méréshez, mint a diffuzorok jelenléte. Myncke legújabb jelentéséből [18] az derül ki, hogy a köbtartalomtól függetlenül helyes az eredmény, ha a diffuzorok felülete legalább 1,4-szerese az alapfelületnek, ahová a mérendő anyag kerül. Saját esetünkben a falak szabálytalan vezetése és a befüggesztett gömbök felülete együttesen nagyjából azonos diffúz felületet ad, mint amekkora az alapfelület, azonban a gömb sokkal jobb diffuzor, mint a hajlított lemez. Ezért a  $129 \text{ m}^3$  térfogatú zengő szobánk bőven teljesíti a diffuzitás feltételeit, és pedig két tercceel kisebb frekvenciától, mint ahogy azt a szabvány képlete megadja.

### Az utózengési idő

A zengő szoba legfontosabb adata a diffuzitáson kívül az utózengési idő, beleértve az elhalás egyenletességét és az utózengés frekvenciamenetét is. Mivel a mérőhelyiségben hangelnyelési vizsgálatokat és egyadatos hangteljesítmény méréseket kívánunk folytatni, rendkívül fontos volt a tér teljes hitelesítése a hely, a frekvencia, valamint a fizikai paraméterek (hőmérséklet, légnyomás, páratartalom) függvényében.

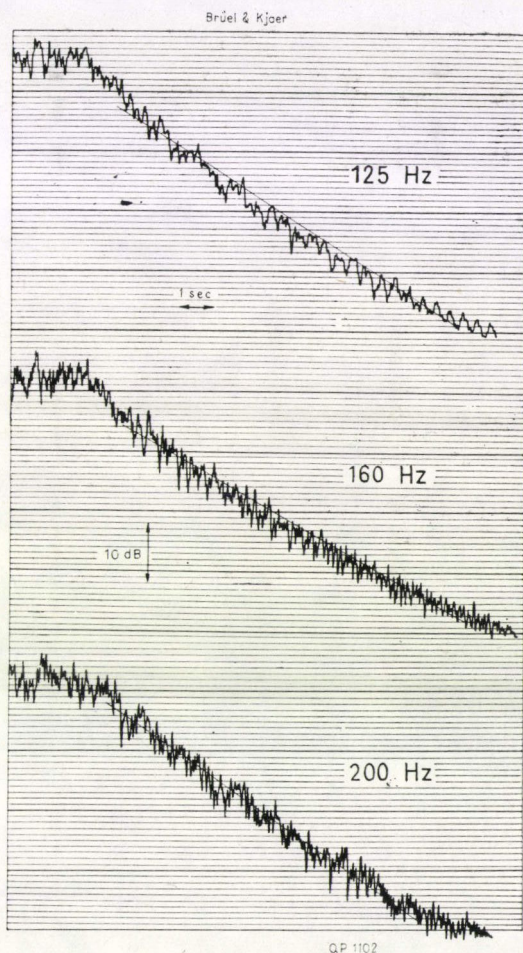


Elsőként a teremhangok frekvenciáját és sűrűségét határoztuk meg. Az első módusok az elméletnek megfelelőleg 29,8; 34,7; 36,9; 45,7; 47,5 és 50,7 Hz-en mérhetők, bár a diffuzorok miatt már itt is mellékmaximumok és frekvencia elmozdulások tapasztalhatók. Színuszos hanggal — sőt ingadozó hanggal is — már csak azért sem szabad mérés céljából a teret gerjeszteni, mert a legkisebb frekvencia- vagy hőmérsékleti változás a mérést megismételhetetlenné teszi. Minthogy a 100 Hz középfrekvenciájú tercsávba már 18—19 teremrezonancia esik, ettől kezdve teremrezonanciák szempontjából egyenletesnek és ingadozásmentesnek tekinthető az energiaeloszlás a térben még tercsáv-  
vos fehér-zajú gerjesztés esetén is.

Mély hangokra azonban túl keskeny a tercsáv szélessége, a sztochasztikus folyamatok elméletéből ismert önmodulációs ingadozás miatt. Ezért 25—30 Hz abszolút sáv szélesség alá mérés technikailag sem mehetünk. Az első tercsáv, amely ezt a feltételt teljesíti, 125 Hz középfrekvenciájú. Ezért nem sok értelme van 180 m<sup>3</sup>-nél nagyobb térfogatú zengő szobát építeni! Valójában az általunk vizsgált 129 m<sup>3</sup> térfogatú zengő szobában 100...125 Hz-en nem rosszabbak a viszonyok, mint 160 Hz-en; e fölött azonban a mérési szórás már minden igényt kielégít.

Az előbbi problémával szorosan összefügg az utózengési folyamat egyenletessége. Három elhalási görbe bemutatásával (125 Hz, 160 Hz és 200 Hz) érzékeltetjük a 17. ábrán, hogy az ingadozások ellenére is könnyű az utózengési idő valószínűségi középértékét meghatározni. A görbékkel kapcsolatban külön megjegyezzük, hogy a rendkívül alacsony zajszint következményeként 50...60 dB szintesítés az egész magas hangok kivételével mindig regisztrálható.

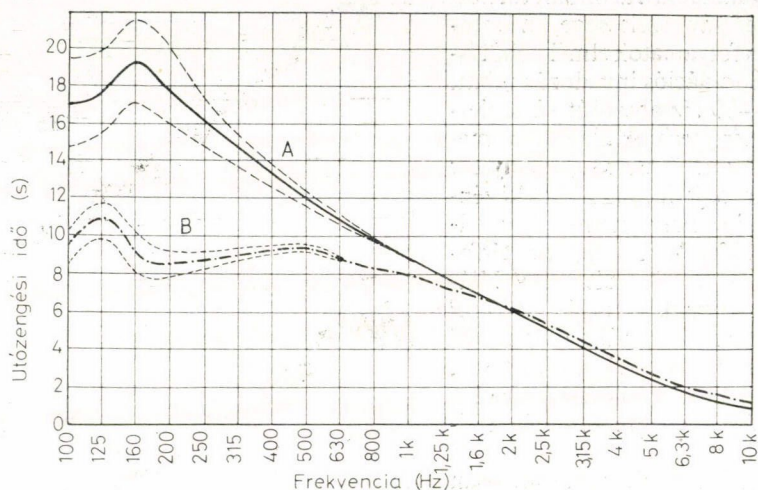
A zengő szoba utózengési idejének frekvenciamenetét a 18. ábrán mutatjuk be. Mély hangokra az értéke 15—20 s, 1000 Hz-en 9 s és 8000 Hz fölött 1 s-ra esik. Teljesítmény mérésekhez azonban előnyösebb az egyenletesebb frekvencia menet. Ez azzal magyarázható, hogy az utó-



17. ábra. Utózengési görbék a zengő szoba üres állapotában 125 Hz, 160 Hz és 200 Hz frekvencián. A kísérlet tercsávós gerjesztéssel és tercsávós vételi szűrővel folyt. A legfelső képen az írássebesség 100 mm/s, az alsó vágás 20 Hz, a másik kettőn 160 mm/s, ill. 50 Hz.



zengési idő meredek változása még tercsávban is bizonytalanná teszi az utózengési időnek egyetlen adattal való jellemzését, és ez mérési hibákhoz vezethet. Az utózengési görbe egyenletesebbé tételének céljára mélyhangú rezonátoros elnyelőt terveztünk. Az egész rendszer fémdobozba zárva a padlón vagy az egyik oldalfalon helyezhető el. A rezonátor utózengést változtató frekvenciamenete szabályozható. Az elkészült darab hatása a 18. ábrán világosan mutatkozik (*B*-görbe). A legnagyobb utózengési értékek csaknem a felére csökkentek, ugyanakkor a többiek alig változtak, sőt az egész magas hangoké mintha még javult volna. Hangforrások teljesítményének méréséhez [19] a termet ebben az állapotában eredményesen használjuk.



18. ábra. Az utózengési idő frekvencia szerinti értéke a zengő szobában. A: az állandó diffúzorokkal, B: a mélynyelű egység lehelyezése után. A mély hangok mérési hibáját szaggatott vonallal jelöltük

Az ideális köbtartalommal kapcsolatban már *Myncke* és *Cops* [18] nyomán megemlítettük az érvényes szabványok túlzott térfogati követelményét. Korábban magunk is készítettünk egy  $10 \text{ m}^3$  nagyságú zengő szobát [20], amelyben az európai körmérések kapcsán a Sillanra csaknem teljesen helyes mérési eredményeket kaptunk [21]. Nemrég *M. Koyasu* [22, 23] arra mutatott rá, hogy a levegő abszorpciója miatt nagyobb frekvenciákon a kisebb térfogatú zengő szobák a jobbakk. Az azonban elfogadhatatlan, hogy három frekvenciatartományban való méréshez három különböző térfogatú zengő szobát szabványosítsunk. Tapasztalatunk szerint a diffúzitás helyes beállítása mellett a  $100 \dots 300 \text{ m}^3$  térfogatú mérőterek egyaránt elfogadhatók.

A mérések, adatok és megállapítások a kutatólaboratórium kollektív munkájának eredményei. Bár az elméleti megfontolásokat és mérés technikai fogásokat részletesebb dolgozatok formájában is közölni óhajtjuk [2, 10, 14], ezúttal is köszönetemet fejezem ki a munkákat irányító és lebonyolító dolgozóknak, kiemelten *Angster Judit*, *Illényi András*, *Korpássy Péter* és *Miklós András* munkatársaimnak.



## IRODALOM

1. ISO R 140 Field and Laboratory Measurements of Airborne and Impact Sound Transmission. 1960.
2. Miklós A.—Korpássy P.: Alapzajmérések süket szobában. Magyar Fiz. Folyóirat (megjelenés alatt).
3. P. Korpássy—A. Miklós: Low Frequency Sounds in Anechoic Chamber. 3rd FASE Symposium, Dubrovnik 1979.
4. H. G. Diestel: Messung des mittleren Reflexionsfaktors der Wandauskleidung in einem reflexionsarmen Raum. *Acustica* 20, 101—104, 1968.
5. M. E. Delany—E. N. Barley: The Design and Performance of Free-field Rooms. Proc. 7th ICA-Congress, Budapest 1971, Vol. 4. 209—212 (24A6).
6. H. Kuttruff—H. G. Bruchmüller: Zur messtechnischen Überprüfung reflexionsarmer Räume. *Acustica* 30, 342—349, 1974.
7. E. Meyer et al.: Ein neuer grosser reflexionsfreier Raum für Schallwellen und kurze elektromagnetische Wellen. *Acustica* 3, 409—420, 1953.
8. M. Grützmacher: Das neue schalltote Raum der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt. *Acustica* 13, 373—376, 1953.
9. F. Ingerslev et al.: New Rooms for Acoustic Measurements at the Danish Technical University. *Acustica* 19, 185—199, 1967/68.
10. Illényi A.—Korpássy P.: Zavaró visszhangok kiküszöbölése süket szobai méréseknél. Magyar Fiz. Folyóirat 28, 398—413 (1980).
11. A. N. Rivin: An Anechoic Chamber for Acoustical Measurements. Sov. Physics — Acoustics (Akuszticeszkij Zsurnal) 7, 258—261, 1962.
12. ISO R 354 Measurement of the Sound Absorption Coefficients in a Reverberation Room. 1963.
13. J. Angster—T. Tarnóczy: Some Problems of Sound Absorption Measurements in Reverberation Room. 3rd Symposium of FASE, Dubrovnik 1979.
14. Angster J.—Miklós A.—Tarnóczy T.: A Zengőszobai mérések általános problémái. Magyar Fiz. Folyóirat (megjelenés alatt).
15. G. W. Kosten: International Comparison Measurements in the Reverberation Room. *Acustica* 10, 400—411, 1960.
16. P. François—C. Ebbing—G. Maling: Results from an International Sound Power Round Robin Concerning Measurements in Reverberation Rooms. *Internoise '73*, Copenhagen 1973, 549—558.
17. R. K. Cook: The Use of Modulated Reverberation for Measurement of Absorption and Sound Power. National Conf. of Noise Control Eng. Washington 1973, 303—308.
18. H. Myncke—A. Cops: Some Considerations on the Measurement of the Sound Absorption Coefficient in Reverberation Rooms. *Internoise '78*, San Francisco 1978, 941—948.
19. ISO 3741 Determination of Sound Power Levels of Noise Sources — Precision Methods for Broad-Band Sources in Reverberation Rooms. 1975.
20. T. Tarnóczy: Akustische Untersuchungen in kleinen Hallräumen. Proc. 3rd ICA-Congress, Stuttgart 1959. Elsevier, Amsterdam 1961 Vol. II. 868—872.
21. M. Lukács—T. Tarnóczy: Absorptionsmessungen für Eichung eines kleinen Halbräumes. II. Akuszt. Konf. Budapest 1961, 20/1—20/7.
22. M. Koyasu: Investigations into the Precision of Measurement of Sound Absorption Coefficients in a Reverberation Room. Proc. 6th ICA-Congress, Tokyo 1968, E 189—192.
23. M. Koyasu: Remarks on the Volume of Reverberation Rooms to be Used for the Sound Absorption Measurements. Proc. 9th ICA-Congress, Madrid 1977, D 13.





# ZAVARÓ VISSZHANGOK KIKÜSZÖBÖLÉSE SÜKET SZOBAI MÉRÉSEKNÉL

ILLÉNYI ANDRÁS és KÖRPÁSSY PÉTER\*

MTA Akusztikai Kutatólaboratórium

A szabad hangtér kimutatására szolgáló  $1/r$  törvény mérése során tapasztalt rendszeres zavarok kiküszöbölésének lehetőségeit mutatjuk be. Az eljárás lényege a mérőrendszer látszólag elhanyagolhatóan kis méretű visszaverő felületeinek hatástalanítása. Ezt úgy érjük el, hogy megakadályozzuk a visszavert hullámok ismételt behatolását a mérési környezetbe. A mérési körülmények gondos finomításával az  $1/r$  törvény az előírt  $\pm 1$  dB-nél nagyobb pontossággal valósítható meg.

## Bevezetés

Hazánkban az első nagyobb méretű süket szoba a MTA Akusztikai Kutatólaboratóriuma számára készült [1]. Süket szobán olyan akusztikai környezetet értünk [2], amelyben visszaverődés mentes, ún. szabad hangtér uralkodik. Ennek ellenőrzésére a hangnyomás-csökkentés  $1/r$  törvényének teljesülését szokták megvizsgálni.

Jelen cikkben azt kívánjuk bemutatni, hogy hangterekben a hullámhossz méreteivel közel egybeeső, de a gyakorlatban sokszor elhanyagolt akadályok milyen mérési bizonytalanságokat okozhatnak. A süket szoba hitelesítési méréseinek előkészítéséről készült beszámolónkat azért is tartjuk időszerűnek, mivel hazánkban a jövőben további süket szobák létesítését tervezik, ugyanakkor az irodalomban bemutatott süket szobai hitelesítő méréseknél [3, 4, 5] általában eltekintenek a zavaró hatások teljes kiküszöbölésétől, pedig e hatások a körülmények gondos mérlegelésével megszüntethetők.

## A süket szobai mérések problémája

Az elméleti akusztika világos megfogalmazásával szemben a gyakorlati szakemberek sokszor abba a hibába esnek, hogy a közel egységnyi elnyelési fokú anyagok felületéről jövő hangvisszaverődésektől eltekintenek. Ezért *Cremer* alapján [6] a problémát röviden ismertetjük. Egy hangelnyelő anyag felületére beeső hanghullám energia mérlege alapján az elnyelési fok

$$\alpha = 1 - |r|^2. \quad (1)$$

\* Jelenleg a Budapesti Semmelweis Orvostudományi Egyetem Fül-, Orr-, Gégeklínikáján dolgozik.

\*\* Érkezett 1979. okt. 15.



Itt  $r = p_-/p_+$  visszaverődési tényező, a  $p_+$  beeső és a  $p_-$  visszavert hangnyomás hányadosa. A  $z_1$  és  $z_2$  akusztikai impedanciájú határfelületen a mérőleges beesésre:

$$r = \frac{z_2 - z_1}{z_2 + z_1}. \quad (2)$$

Ez az egyszerű eset szokott félreértéseket okozni, hiszen ha  $z_1 = z_2$ , akkor  $\alpha = 1$ . A szokásos hangnyelő anyagok és a levegő határfelülete a  $z_1 = z_2$  feltételnek nem tesz eleget. Az  $R$  áramlási ellenállású anyagok esetében (2) a következő alakba megy át:

$$r = \frac{R}{2z + R} = \frac{1}{1 + 2 \frac{z}{R}}. \quad (3)$$

Ha a beesés nem mérőleges, a visszaverődési tényezőt és a fázisugrást a beesési szögtől függő, ún. falimpedancia,

$$W(\vartheta) = \frac{p_+ + p_-}{p_+ - p_-} \cdot \frac{z}{\cos \vartheta} \quad (4)$$

szabja meg. Ezáltal a visszaverődési tényező

$$\frac{p_-}{p_+} = e^{j\gamma} \cdot \frac{W(\vartheta) \cos \vartheta - z}{W(\vartheta) \cos \vartheta + z}. \quad (5)$$

A legnagyobb hangnyelés szögét a

$$\cos \vartheta = \frac{z}{(W)} \quad (6)$$

összefüggés adja meg.

Vizsgálatainknál álló hangforrást és egyenes vonal mentén mozgó mikrofont használtunk. Ilyen elrendezés esetén a pályától  $y$  távolságra levő falról visszaverődő hang az eredeti hanggal közelítőleg a

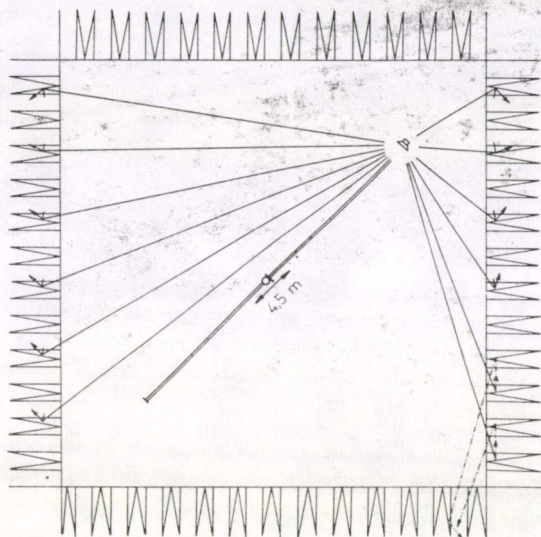
$$p = 2p_+ e^{jky \left( \frac{W}{z} + jk(-x) \right)} \cdot e \quad (7)$$

formában interferál. Azaz  $p$  lehetséges legnagyobb ingadozása  $0 \leq p \leq 2p_+$ , az  $x$  távolságtól, a  $k$  hullámszámtól, a  $w/z$  impedancia aránytól, és az  $\varepsilon = 90 - \vartheta$  beesési szögtől függően. Az eredmény az eredetihez képest  $\gamma$  fázissal eltolt bemenő jel elektromos analógiájával könnyen áttekinthető. Méréseink során mindig visszaverődésekre gyanakodtunk, ha ilyen fajta ingadozás volt felfedezhető az eredményeken.

### A mérési eljárás és a mérőberendezés

A szabad hangteret folyamatosan mozgatott mikrofon segítségével lehet kimutatni [7, 8]. A mozgó mikrofon a hangtér különböző pontjaiban a hangforrás közvetlen hangján kívül a visszaverődött, másodlagos hullámokkal is találkozhat, ilyenkor az  $1/r$  hangnyomás csökkenést követő mérési görbén interferenciás inga-

dozások jelentkeznek. Ezen ingadozások egy jól kivitelezett süket szobában nem léphetik túl a  $\pm 1$  dB értéket. Ez az érték elég nagy, hiszen a süket szobák falait hangnyelő ékekkel burkolják, olyan elrendezésben, amely a beeső hanghullámokat mindig az elnyelő anyag felé veri. Esetünkben az ékek csúcs-szöge  $18^\circ$ . A megtört hanghullámoknak az eredeti hangtérbe való visszajutása tehát gyakorlatilag lehetetlen (1. ábra).



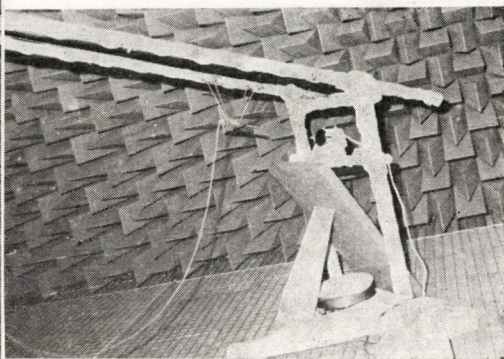
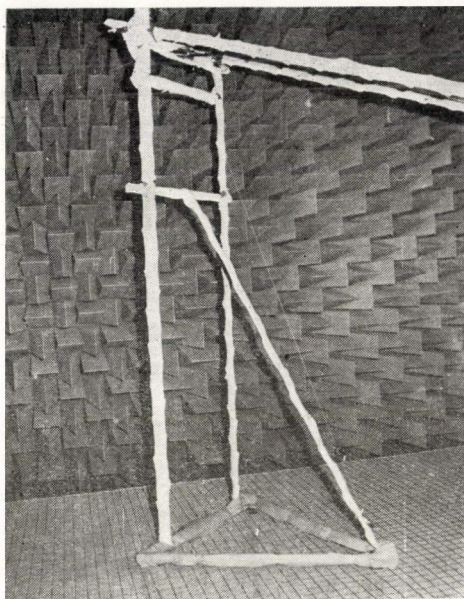
1. ábra. A süket szobában felszerelt mikrofonpálya felülnézeti rajza. Az ékek csúcsszöge  $18^\circ$ . Az ábráról jól látható, hogy a hangsugarak az ékek közt a falak felé törnek. A szobába történő visszajutás csak a méréstől legtávolabbi sarokban és csak az ékekről történő többszörös visszaverődés (!) után jöhet létre

Az  $1/r$  törvény ellenőrzésére félautomatikus mérési eljárást dolgoztunk ki. A süket szoba egyik térátlója mentén lejtősen elhelyezett mikrofon pályát építettünk ki. Ezt a süket szoba két, szilárdan alátámasztott, a járóháló fölött 10 cm-re elhelyezett háromszög alakú, belső szögvas szerelvényére rögzítettük. A mikrofon kifeszített huzalpáron mozgatott kocsihoz volt szerelve. A pálya hossza 4,5 m és a vízszintessel bezárt szöge  $21^\circ$  volt. Alsó végpontjában helyeztük el a hangsugárzót, ügyelve arra, hogy annak tengelye és a mérőmikrofon tengelye a mozgás során mindvégig egy egyenesbe essen. A mikrofont két csigán átvett fonál segítségével a Brüel és Kjaer 3921 típusú forgóasztal mozgatta egyenletesen. A mikrofon pályát a 2. ábrán láthatjuk.

A forgóasztalra egy pontosan 0,5 m kerületű fonálfelcsavaró dobót és egy fordulatjelző érintkezőt helyeztünk. Ezáltal a forgóasztal minden egyes fordulatinál helyzetjelzést (marker) küldött a szintíróhoz. Így a szintíró által kirajzolt hangnyomáásszint-távolság jelleggörbén a mikrofon helyzete 0,5 m-enként automatikusan megjelent. Az első helyzetjel a hangforrástól 0,5 m-re volt. A fonál speciálisan választott, nem nyúló, hajlékony sodrott műanyag skálazsinór volt. A huzalpálya



kerékpár bowden huzalból készült, feszességét rugós szabályozórendszer biztosította. Az állványzat „dexion salgó” idomokból épült fel. A hitelesítés és beszabályozás után a mikrofont kívülről a szintíró segítségével vezéreltük. A felszerelt forgóasztalt a 3. ábra mutatja. A pálya végére kikapcsoló érintkezőt szereltünk fel.



2. ábra. A mikrofonpálya és a hangelnyelő anyaggal burkolt tartószerkezet. (Az első mérések még burkolatlan tartószerkezettel történtek.)

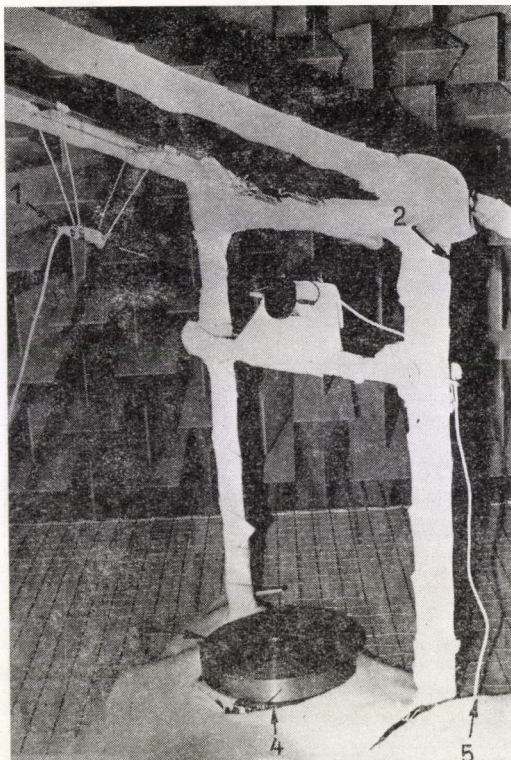
A mikrofont hordozó kocsit elérve, a mozgatót és a mérést is leállította (l. a 4. ábrát).

A mérőberendezés elektromos részei: Brüel és Kjaer (BK) 1014 típ., illetve BK 1024 típ. hanggenerátor, BK 4165 típ. szabadtéri mérőmikrofon, BK 2801 típ. tápegység, BK 2107 típ. táperősítő, BK 2305 típ. szintíró, BK 3921 típ. forgóasztal. A forgóasztal jól szinkronizálható a mérés eredményeinek rögzítésére szolgáló szintíróval. A BK berendezések közötti távvezérlést némi külső kapcsolási változtatással célkitűzésünknek megfelelően módosítottuk. A mérési összeállítás vázlatát az 5. ábra tünteti fel.

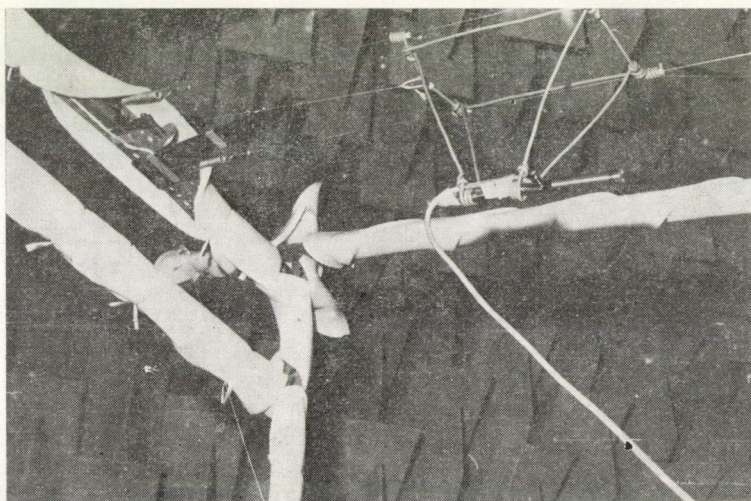
A hangforrásnak a hullámhossznál kisebb átmérőjűnek kell lennie, ezért  $f < 1$  kHz esetén az Elektroakusztikai Gyar HOX 50 kis méretű dobozos hangsugárzóját használtuk. Nagyobb frekvenciák esetén Goodman's nyomókamrás hangszóróval dolgoztunk, amelynek 1 cm átmérőjű hangnyílásához különböző alakú csöveket is illesztettünk. A méréseket diszkrét frekvenciákon végeztük a 125 Hz—16 kHz tartományban, általában oktávonként, és különböző hangnyomás-szinteken. A hangszóróra jutó elektromos teljesítmény 1—2 W volt.

Az  $1/r$  törvénytől való eltérések ábrázolása kétféle módszerrel történhet. Az egyik módszerrel magát az eltérést tüntetjük fel a távolság függvényében, akár folya-



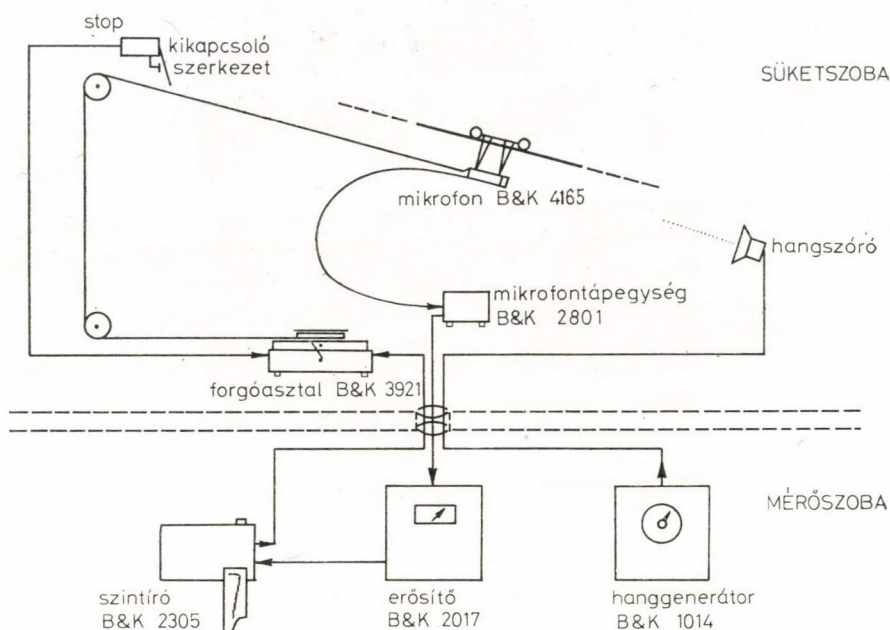


3. ábra. A mikrofont (1) automatikusan mozgató forgóasztal (3), a kötéldobbal (5) és a marker-jelet adó érintkezővel (4). A hangszóró (2) a mikrofonnal szemben helyezkedik el.



4. ábra. A mikrofonkocsi és a pálya végére szerelt kikapcsoló szerkezet





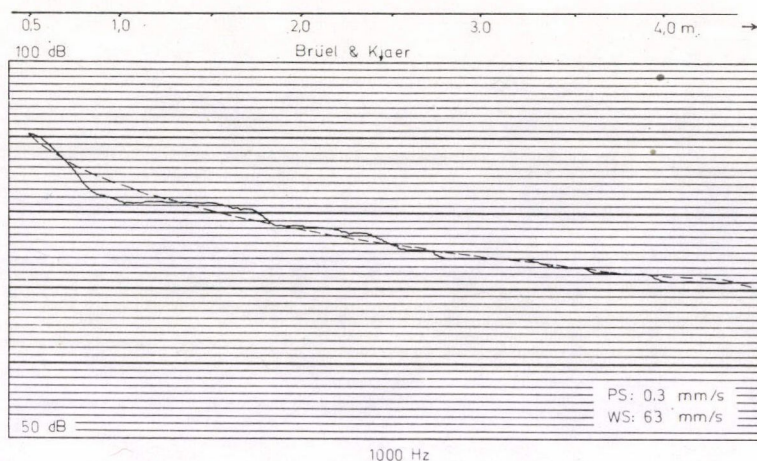
5. ábra. A mérési összeállítás blokkvázlata

matosan, akár diszkrét pontokban [8, 9]. A másik módszernél közvetlenül a mért hangnyomásszintet rajzoljuk ki folyamatosan a távolság függvényében. Ekkor viszont a regisztrált mérési görbe mellé be kell húzni az elméletileg számított  $1/r$  görbét is [10]. Méréseink során ez utóbbi módszert alkalmaztuk.

## Eredmények

### 1. Dobozos hangsugárzó

Az oktávonkénti szinuszos hangokkal végzett mérések közül a 125 Hz, 250 Hz és 500 Hz esetén kapott görbék megfeleltek a várakozásnak, vagyis az  $1/r$  törvény  $\pm 1$  dB-en belül teljesült. Nagyobb frekvenciákon azonban jelentősebb eltéréseket tapasztaltunk a szabadtéri terjedés törvényétől (6. ábra). A jelenség okát kutatva először arra gondoltunk, hogy a falakat burkoló hangelnyelő „Sillan” ékek a bizonyos szögekből beeső hanghullámokat talán kis mértékben visszaverik és az így létrejövő zavaró jelek rontják el a szabad teret a mérés környezetében. (Pl. 1000 Hz esetén a hullámhossz kb. 34 cm, és két párhuzamos állású ék távolsága 40 cm). Azonban a megszerkesztett jellegzetes hangsugár utak azt mutatják, hogy szinte minden beesési szög esetén a tört sugár az ékek között befelé halad tovább, majd többszörös ide-oda verődés után fokozatosan elnyelődik. (1. ábra.) Igen érdekes beesésnél a második visszaverődés után kaphatunk a falak mentén a belső térbe visszatérő hangsugarakat is. Ez az eset azonban, amint a szerkesztés alapján lát-



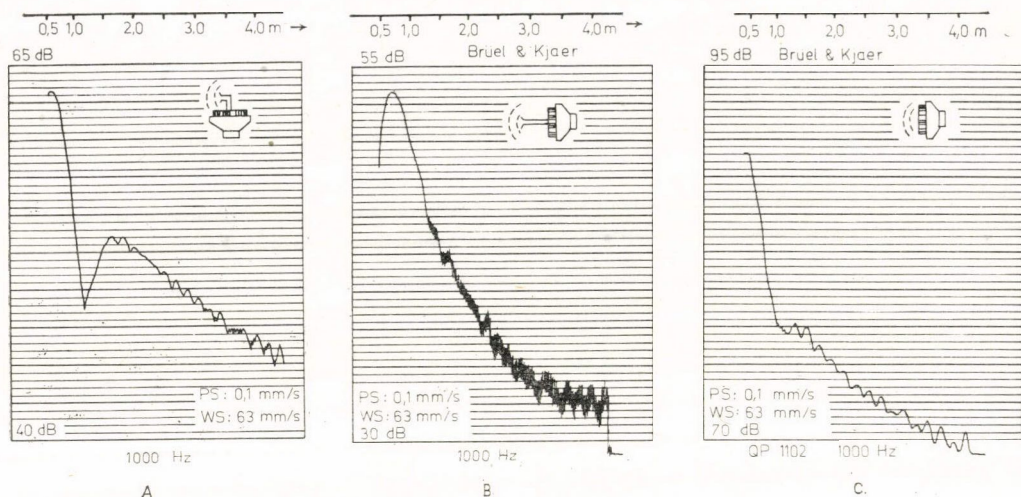
6. ábra. Az 1000 Hz-en mért hangnyomásszint—távolság jellegzőgörbe. Az ábra felső részén látható a forgóasztal által 0,5 m-enként (=1 fordulat) leadott marker jel. A szintíró adatai: papírsebesség 0,3 mm/s, írássebesség 63 mm/s, dinamika tartomány 50 dB. Az  $1/r$  törvény szerint számított elméleti görbét szaggatott vonallal jelöltük be. A mért, ill. számított görbék eltérése számottevő

ható, csak a süket szoba határfelületei mentén fordulhat elő. Mindezeket figyelembe véve megállapítottuk, hogy az  $1/r$  törvénytől az eltérést nem a falak esetleges visszaverődése okozza. A továbbiakban feltételeztük, hogy az eltéréseket a hangforrás véges mérete eredményezi. Ezért pontszerű hangforrás alkalmazására tértünk át.

## 2. Pontszerű hangforrások

Nagyméretű hangszóró esetén a hangszóró egyes pontjaiból kiinduló hangsugarak a kisméretű mikrofon membránig különböző hosszúságú hangutakat tesznek meg, ami az észlelő mikrofonnál interferenciás jelenségeket eredményezhet. Esetünkben a hangszóró és a mikrofon felületi méreteinek aránya mintegy százszoros volt, tehát a fent leírt esettel számolnunk kellett. A továbbiakban a közvetlen sugárzó 125 mm Ø-jű dinamikus hangszóró helyett egy Goodman's Trebax típusú nyomókamrás hangszórót használtunk, melynek kör alakú nyílása 1 cm felületű. E nyílásba különböző alakú és hosszúságú illesztő csöveket helyeztünk. A csövek végeit a jobb csatolás végett [8] kiperemeztük. Három különböző elrendezést próbáltunk ki: első esetben (a) a cső mentén a hangút derékszögben meg volt törve, másodszor (b) egyenes toldalékcsővet alkalmaztunk, és végül (c) toldalékcső nélkül végeztünk méréseket. Az eredményeket és az egyes hangforrás megvalósításokat a 7. ábra képei tüntetik fel. Ezeket az eredményeket a 6. ábrával összevetve, a harmadrészre összenyomott távolságskála ellenére is jól látható, hogy a pontszerű hangforrás a véges méretű hangforráshoz képest tovább fokozta a szabálytalanságokat. Ugyanakkor jól látható az is, hogy a nyomókamra csatolása a külső közeggel jelentősen befolyásolja az eredményeket s legkedvezőbb csatolás a c. megoldással adódik,





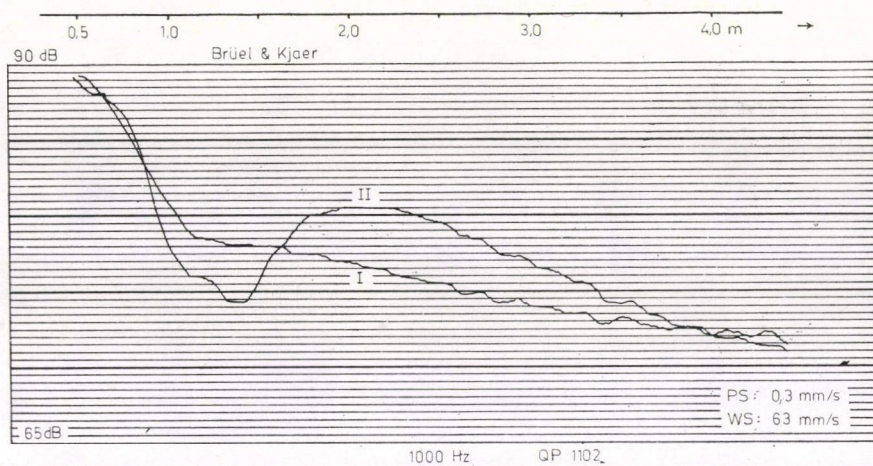
7a–7c ábrák. Különböző csatolású pontszerű hangforrások mérése 1000 Hz-en, a) derékszögben megtört toldalékcsővel, b) egyenes toldalékcsővel, c) toldalékcső nélkül

ezért a továbbiakban a toldalékcövet elhagytuk. A szabálytalanságok okát pedig nem a hangforrásban, hanem a mérőmikrofon közvetlen hangterébe jutó hangviszaverődésekben kell keresni, mert a visszaverő felületeknek a zavaró hatása annál nagyobb, minél pontszerűbb és minél határozottabb frekvenciájú hangforrást alkalmazunk. Zörej jellegű jelek a görbe szabálytalanságait bizonyos mértékben csökkentették.

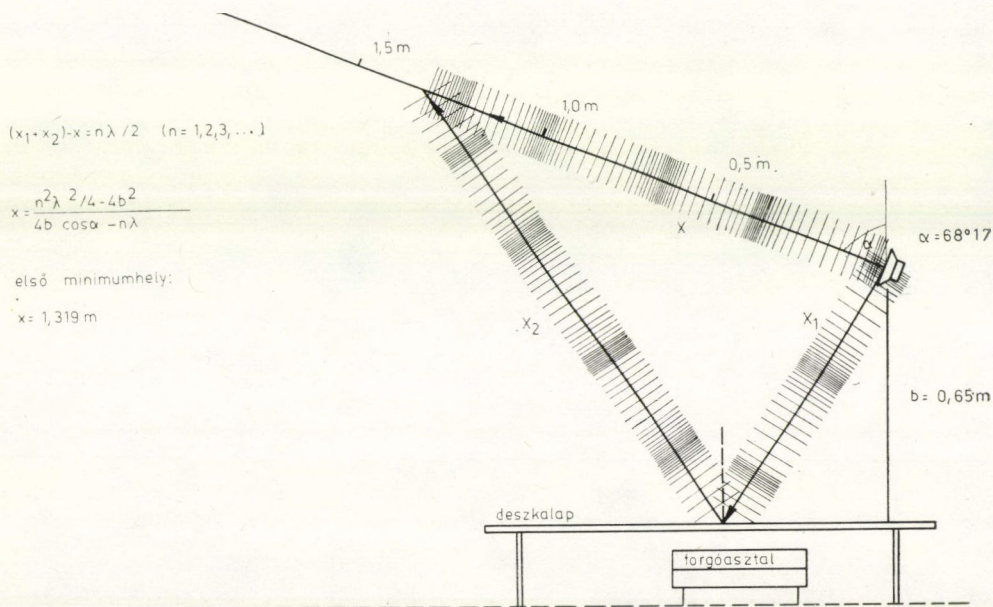
### 3. A mérőállvány és a mérőberendezés okozta visszaverődések kiküszöbölése

Felismerve a mérési elrendezés kisméretű, de mégis visszaverő felületeit, habzsvacs csikokkal beburkoltuk a mikrofonpályát tartó valamennyi, korábban burkolatlan tartórudat és a feszítőkeretet. Az interferenciás zavarok jelentősen csökkentek (vö. 8. ábra I. görbáját a 7c ábrával). Továbbra sem szűnt meg azonban a görbe kezdeti szakaszán a hirtelen esés, és az 1–1,5 m közötti kismértékű lapos szakasz. Ez a jelleg egy viszonylag kiterjedtebb visszaverő felületre utalt, amelyet a mikrofont meghajtó forgóasztal felső lapos felületével azonosítottunk (lásd 3. ábra). Ennek pontosabb vizsgálata céljából közvetlenül a forgóasztal fölé elhelyeztünk egy 0,5 m<sup>2</sup> vízszintes helyzetű sima deszkalapot, feltételezve, hogy a megnövekedett felületről jövő fokozottabb visszaverődés tovább rontja a jelleggörbe alakját. A jelenség jól látszik a 8. ábra II. görbájén. A közvetlen és a visszavert hangsugár utak (9. ábra) megszerkesztése alapján látható, hogy a kritikus 1–1,5 m tartományban  $x=1,32$  m-es mikrofontávolságnál a két hullám ellentétes fázisban találkozik, tehát az eredő hangnyomásszint lecsökken.

A forgóasztal felületének zavaró hatását egy hangelnyelő „Sillan” lap behelyezésével küszöböltük ki, melyet úgy állítottunk be (10. ábra), hogy a forgóasztal irányába terjedő hanghullámokat a falak felé verje. A lap behelyezése után kapott eredmény (11. ábra) mutatja, 1000 Hz-en már a kívánt  $1/r$  szerinti választ kaptuk

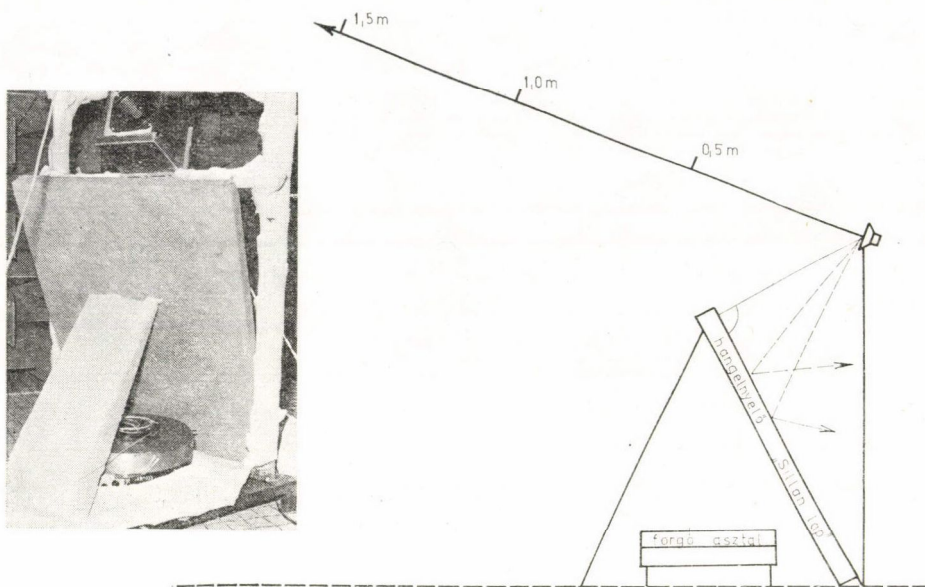


8. ábra. A forgóasztal fölé vízszintesen elhelyezett visszaverőlap hatása 1000 Hz-en. (I. eredeti állapot, II. visszaverőlappal.)

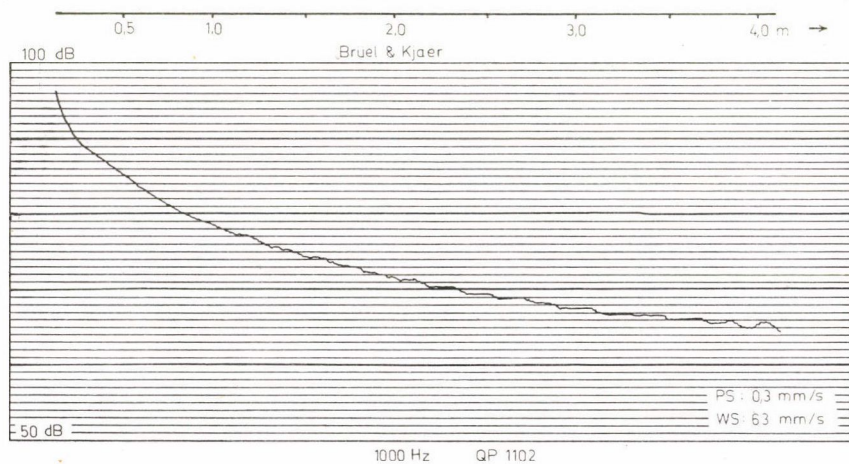


9. ábra. A visszavert és közvetlen hanghullámok interferenciájának rajza



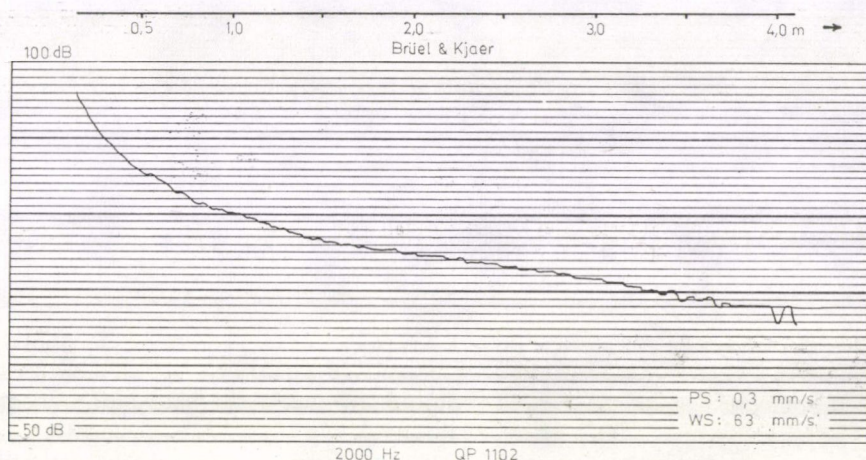


10. ábra. A 9. ábrán bemutatott interferencia kiküszöbölése. A hangforrásból a forgóasztal felé haladó hangsugarakat a ferdén behelyezett hangelnyelő „Sillan” lap nagyrészt elnyeli, ill. a falak felé tereli

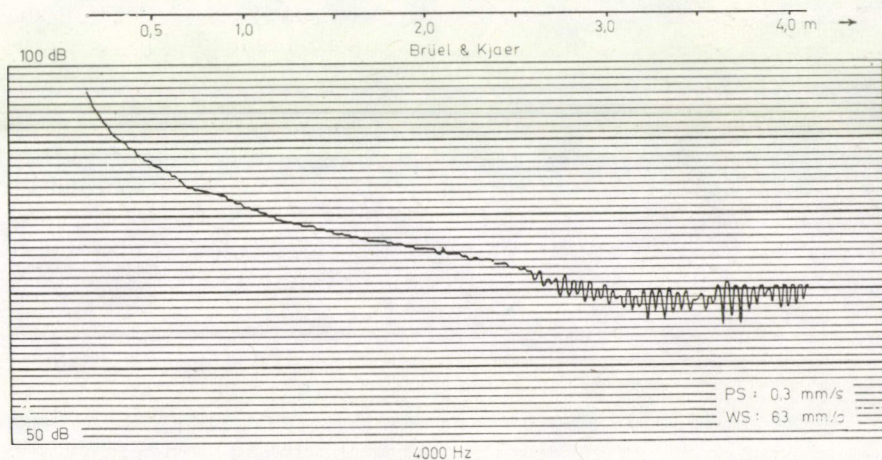


11. ábra. A hangnyomásszint—távolság jelleggörbe 1000 Hz-en, a forgóasztal okozta reflexió megszüntetése után

meg. Nagyobb frekvenciákon, 2000 Hz-en és főképpen 4000 Hz-en azonban újabb zavaró hatások léptek fel (12. és 13. ábra). A hangforrástól 2,5–4 m távolságra erős hullámszás tapasztalható a jelleggörbén. A 13. ábra ingadozásainak két csúcsa közötti távolság megegyezik a 4000 Hz frekvenciájú hang fél hullámhosszával. Itt tehát ismét a közvetlen és egy valahonnan visszavert hullám találkozik, melyeknek eredője az ábrán látható állóhullámszerű hangteret eredményezi. A jelenséget számításaink szerint csak a mikrofonpályát körülhatároló, egyébként már hangelnyelő habzivaccsal burkolt, elnyújtott téglalap alakú merevítőkeret okozhatta.

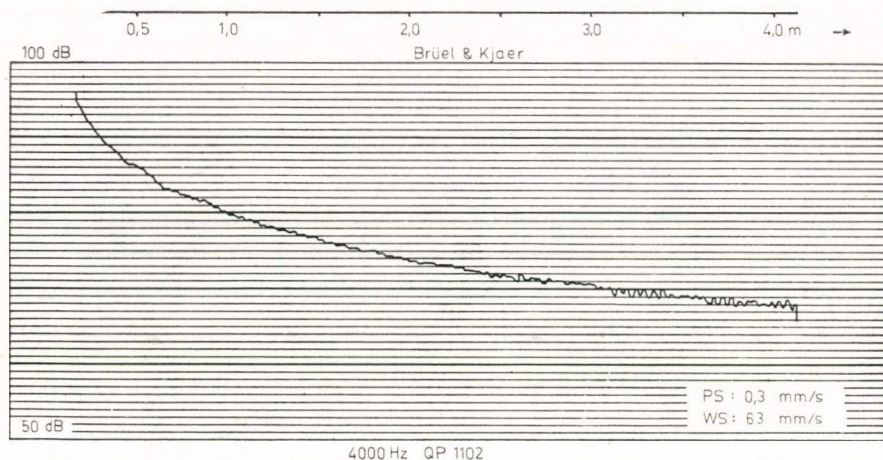


12. ábra. A hangnyomásszint—távolság jelleggörbe 2000 Hz-en, kisebb szabálytalanság tapasztalható a mérési pálya vége közelében

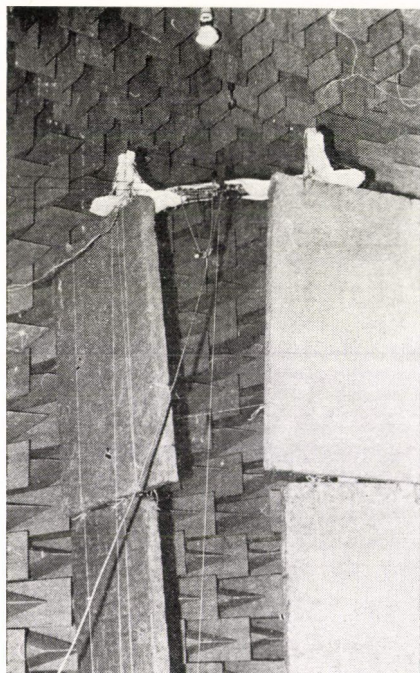


13. ábra. A hangnyomásszint—távolság jelleggörbe 4000 Hz-en. A hangforrástól 2,5–4 m távolságban a görbe erősen hullámszik. Ez a jelenség állóhullámok létrejöttét jelzi, azaz újabb reflexiós felületek vannak a hangtérben





14. ábra. A mikrofonpályát tartó keret leszerelése után mért hangnyomásszint—távolság jelleggörbe 4000 Hz-en. A reflexiók nagymértékben csökkentek

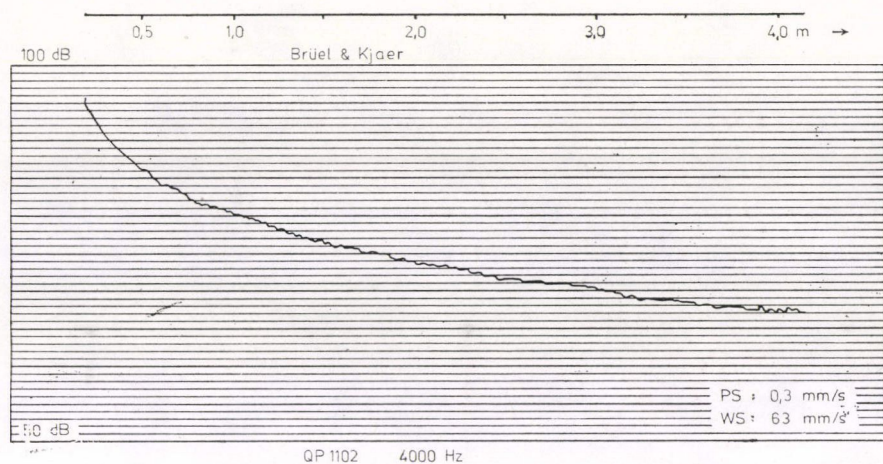


15. ábra. Az állványzatra szerelt elfordított helyzetű „Sillan” hangelnyelő lapok nagyrészt elnyelik ill. a falak felé terelik a rájuk eső hanghullámokat

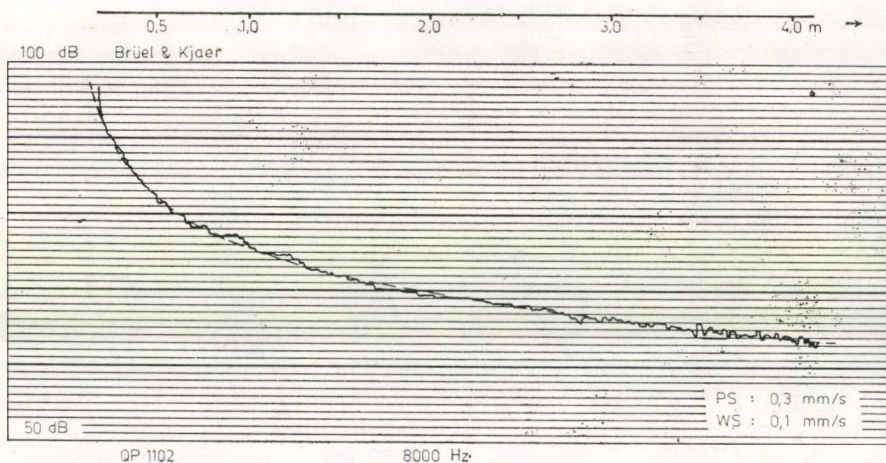
E zavaró hatás megszüntetése céljából a mikrofonpályát tartó keretet (2. ábra) eltávolítottuk, a merevség biztosítására pedig az állványokat a sűket szoba tetején levő kampókhoz kötöttük ki drótkötéssel. Ezt követően 4000 Hz-en a zavaró visszaverődések jelentősen mérséklődtek (14. ábra). A megmaradt kis mértékű ingadozásokat a mikrofonpálya végén elhelyezkedő, már ugyan habzivaccsal beburkolt állványzat hatásának tulajdonítottuk. Az innen származó visszaverődések elkerülésére e függőleges állványzatra elfordított helyzetű „Sillan” lapokat akasztottunk. A lapok hajlásszögét úgy állítottuk be, hogy a rájuk eső hanghullámokat egyértelműen a falak felé verjék vissza (15. ábra). E módosítást követő mérés most már 4000 Hz-en is a várakozásnak megfelelő eredményt adott (16. ábra).

Magasabb frekvenciákon is elvégeztük a méréseket, 8000 Hz-en újabb interferencia jelentkezett (17. ábra). Az eddigiek alapján már úgy véltük, hogy több visszaverő felület nem létezhet a mérési elrendezésben. Kiderült azonban, hogy a hibát az eddig be nem burkolt, sőt kis mérete miatt figyelembe sem vett B&K mikrofonkábel csatlakozó





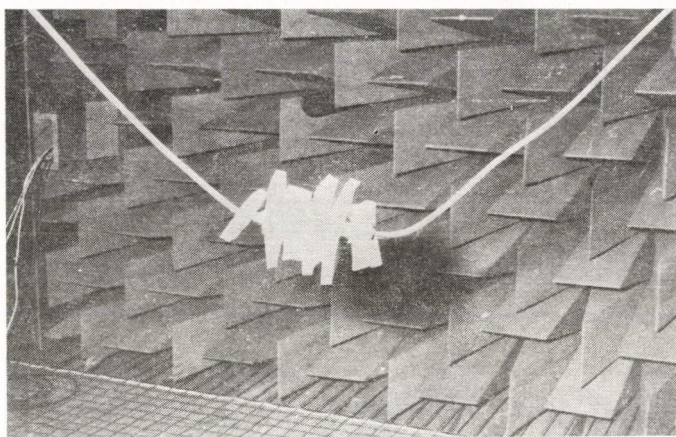
16. ábra. A 15. ábrán látható hangelnyelő lapok felszerelése után mért hangnyomásszint—távolság jelleggörbe 4000 Hz-en. Az állványzat okozta reflexiók megszűntek, a görbe alakja szabályos



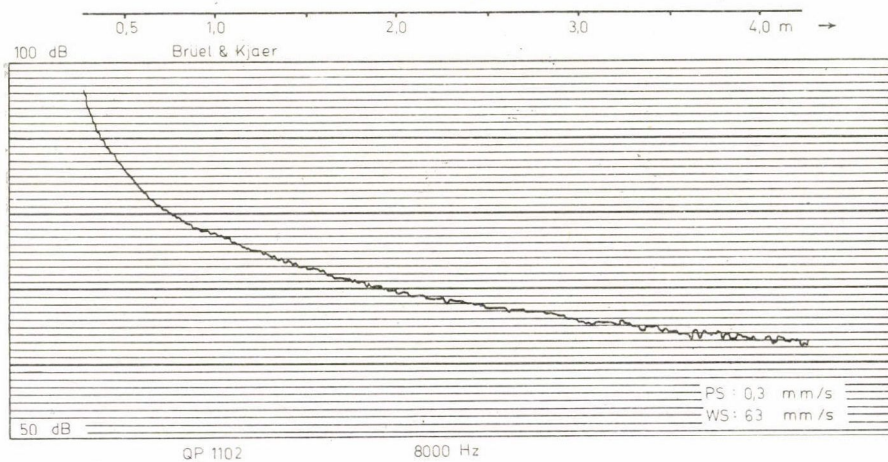
17. ábra. A mikrofonkábel csatlakozójáról történő reflexió hatása a hangnyomásszint—távolság jelleggörbén. Az elméleti  $1/r$  törvény görbáját szaggatott vonallal húztuk meg

okozta. A csatlakozót merőlegesen elhelyezett, egymáshoz képest elforgatott, szögletes habszivacs lapokkal burkoltuk be (18. ábra), ugyanakkor a lehetőségekhez képest minél távolabbra helyeztük el a mérés helyétől. A módosítás utáni mérés az  $1/r$  törvénynek eleget tevő görbét eredményezte a várt  $\pm 1$  dB-en belüli hibával (19. ábra). Továbbmenve 16 000 Hz-en már nem várt ránk újabb meglepetés.





18. ábra. A habszivacs lapokkal burkolt kábelcsatlakozó



19. ábra. A B & K kábelcsatlakozó beburkolása után mért hangnyomásszint—távolság jelleggörbe 8000 Hz-en már eleget tesz az  $1/r$  törvénynek

### Összefoglalás

A cikk az MTA Akusztikai Kutatólaboratórium süket szobájában végzett szabad hangtér méréseknél adódó zavaró hangvisszaverődések, interferenciás jelenségek fokozatos felderítéséről és ezek megszüntetésének lehetőségeiről számol be. Vizsgálataink során több olyan nem várt problémával kerültünk szembe, melyekre — úgy érezzük — érdemes felhívni a szakemberek figyelmét. Tapasztaltunk jelenségeket, amelyek elméletileg ugyan ismertek, de amelyek a mérési környezet eddigi gyakorlatában nem jelentkeztek. Ennek egyik meglepő példája a mérések során



általánosan használt mikrofonkábel csatlakozóról tapasztalt visszaverődés, amely  $\delta > 1$  dB nagyságú hibát okozhat. Erre a jelenségre tudomásunk szerint még senki sem hívta fel a figyelmet. Munkánk során bebizonyosodott, hogy a kisméretű elnyelő hatású felületekről is kapunk visszaverődéseket, melyek pontos méréseknél nem elhanyagolható zavarokat eredményeznek. A reflexiók szabad hangteret elrontó hatását a következőképpen célszerű kiküszöbölni: a) A süket szobában levő valamennyi felszerelés, állvány, támasz oldalait jó hangelnyelő tulajdonságú anyagokkal burkoljuk, b) e burkoló lapokat olyan szögben erősítjük fel, hogy az általuk kismértékben visszavert hanghullámok a süket szoba falai felé verődjenek. További megfigyelés, hogy a hangteret nem annyira a geometriai hangsugárral, hanem inkább az akadályok szélein elhajló haladó hanghullámfront törvényszerűségeivel írhatjuk le pontosabban. Munkánk során elértük, sőt meghaladtuk a szabványok szerint megkövetelt határt, az  $1/r$  törvénynek a  $\pm 1$  dB pontosságon belüli teljesítését. A körülmények további finomításával szükség esetén a jelenleginél még pontosabb szabad hangtér mérést is meg tudunk valósítani.

### Köszönetnyilvánítás

A szerzők köszönetet mondanak a MTA Akusztikai Kutatólaboratórium igazgatójának, dr. Tarnóczy Tamás professzornak a munka irányításáért, valamint a laboratórium egész kollektívájának, különösen Falusy István és Deák Péter műszerészeknek a munka során nyújtott segítő közreműködésükért.

### IRODALOM

1. Tarnóczy Tamás: A Tudományos Akadémia akusztikai mérőhelyiségeinek műszaki adatai, Magyar Fizikai Folyóirat 20, 377—397 (1980).
2. Akusztikai Alapfogalmak Fizikai Akusztika — Teremakusztika MSZ 3391/4—73 és Hangtani mérések — MSZ 3392—54 (2, 31).
3. W. Bausch, R. Schubert: Reflexionsarme Schallmessräume. Frequenz 13, 324—331, 1959.
4. M. U. Wilhelm, A. Wolf: Messräume für akustische Untersuchungen. Wärme—Kälte—Schall 2, 4—21, 1965.
5. D. E. L. Schorter, C. L. S. Gilford, H. D. Harwood: The acoustic design and performance of a new free — field sound measurement room. BBC Engineering Monograph No. 59. (1965. September) 18.
6. L. Cremer, H. A. Müller: Die Wissenschaftlichen Grundlagen der Raumakustik, Band II. S. Hirzel V., Stuttgart, 1976. 2. Aufl., Kap. 2, 3, 7.
7. J. Radnai, A. Illényi: The synchronization of a B. & K. Level Recorder Type 2305 for spatial plotting. B. & K. Technical Review, 4, 17—23, 1969.
8. F. Ingerslev, O. J. Pedersen et al.: New Rooms for Acoustic Measurements at the Danish Technical University. Acustica 19, 185—199, 1967/68.
9. W. Koidan, G. R. Hruska: Acoustical properties of the National Bureau of Standards anechoic chamber. JASA 64, 508—516, 1978.
10. P. Hedegaard: Free-Field Response of Sound Level Meters Brüel & Kjaer Technical Review 1976. No. 2.





# A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

## A DISZPERZIÓ KVANTUMELMÉLETE\*

P. A. M. DIRAC

Cambridge, St. John Kollégium; Göttingen, Elméleti Fizikai Intézet

### 1. § Bevezetés és áttekintés

Az új kvantummechanika a sugárzással kapcsolatos kérdések megoldására először csak klasszikus fizikai elméleti analógiák segítségével volt alkalmazható, Heisenberg eredeti mátrixelméletében például feltételezték, hogy egy atom polarizációjának mátrixelemei a klasszikus elmélet szerinti Fourier-komponensekhez hasonlóan meghatározzák a sugárzás kibocsátását és elnyelését. Az újabb elméletekben\*\* az elektromos sűrűsége egy bizonyos, a kvantummechanikából nyert kifejezést használnak a kibocsátott sugárzás meghatározására ugyanazokkal a képletekkel, mint a klasszikus elméletben. Ezek a módszerek sok esetben kielégítő eredményt adnak, de nem alkalmazhatók olyan problémáknál, ahol a klasszikus analógiák homályosak vagy nem is léteznek, mint például a rezonanciasugárzás és a spektrumvonalak szélességének magyarázata.

A szerző felállított egy sugárzáselméletet, amely szilárdabb alapokon nyugszik.\*\*\* Kitűnik ebből, hogy egy sugárzási mezőt dinamikai rendszerként lehet fel fogni, amelynek egy közönséges atomrendszerrel való kölcsönhatása egy Hamilton-függvénnyel írható le. A mezőt jellemző dinamikai változók a mező különböző harmonikus komponenseinek, melyek mindegyike effektíve egy egyszerű harmonikus oszcillátor, energiái és fázisai. Természetesen a kvantumelméletben ezeket a változókat  $q$  számoknak kell tekintenünk, amelyek a megfelelő kvantumfeltételeket kielégítik. Ekkor azt találjuk, hogy a Hamilton-operátor a mezőnek egy atommal való kölcsönhatása esetén ugyanolyan alakú, mint a fénykvantumok egy sokasága és egy atom kölcsönhatása esetén. Így itt a hullám és a fénykvantum nézőpont között teljes formai egység áll fenn.

Az elméletnek sugárzási problémák gyakorlati kidolgozására való alkalmazásánál a perturbációs módszert kell használnunk, mivel a Schrödinger-egyenletet közvetlenül megoldani nem tudjuk. Feltehetjük, hogy a Hamilton-függvényben a sugárzás és az atom kölcsönhatásából származó tag (mondjuk  $V$ ) kicsi az önálló rendszerek energiáját kifejező taghoz viszonyítva és így  $V$ -t mint perturbáló energiát használjuk. Fizikailag a feltevés az, hogy az atom átlagos élettartama bármely állapotban nagy a rezgési periódusaihoz képest. A jelen írásban az elméletet az atom által szórt sugárzás meghatározására alkalmazzuk, tekintetbe véve azt az esetet is, midőn a beeső sugárzás frekvenciája egybeesik az atom valamelyik spektrumvonalával.

\* Megjelent Proc. Roy. Soc. Lond., A, 114, 710, 1927.

\*\* E. Schrödinger, Ann. d. Physik, 81, 109, 1927. — W. Gordon, „Z. f. Physik”, 40, 117, 1926. — O. Klein, „Z. f. Physik”, 41, 407, 1927.

\*\*\* Roy. Soc. Proc. A, 114, 243, 1927. Későbbiekben *loc. cit.* gyanánt hivatkozunk rá.



Azt a módszert használjuk, hogy a Schrödinger-egyenletnek olyan megoldását keressük, amely bizonyos kezdeti feltételeknek eleget tesz, az atom és a mező adott kezdeti állapotának megfelelően. Általánosan ezt a következőképpen lehet leírni:

Ha a  $V_{mn}$  számok a  $V$  perturbációs energia mátrixelemeit jelentik, ahol minden  $m$  vagy  $n$  index a teljes atom + mező rendszer egy stacionárius állapotára vonatkozik, és az atom stacionárius állapotát, mondjuk  $J$  hatásváltozói, a mezőét pedig egy, a harmonikus összetevők szerinti energiacsozlás vagy pedig a fénykvantumok adott elosztása jellemzi, akkor minden  $V_{mn}$  a megfelelő  $n$  állapotból az  $m$  állapotba való átmenetet írja le\*; pontosabban,  $V_{mn}$  az  $m$  állapotot jellemző sajátfüggvény növekedését adja meg, ha az  $n$  állapotot jellemző már gerjesztett, mivel a sajátfüggvény  $a$  amplitúdójának változási sebességére vonatkozó általános kifejezés\*\*

$$i\hbar/2\pi \cdot \dot{a}_m = \sum_n V_{mn} a_n = \sum_n v_{mk} a_n e^{2\pi i(W_m - W_n)t/\hbar}, \quad (1)$$

ahol  $v_{mn}$  a  $V_{mn}$  mátrixelem állandó amplitúdója és  $W_m$  az  $m$  állapot teljes sajátenergiája. Ezeknek az egyenleteknek megoldására egy első közelítést kapunk, ha a jobb oldalon az  $a$ -k helyett kezdeti értéküket tesszük; egy második közelítést kapunk, ha ezeket az  $a$ -kat az első közelítésben nyert értékekkel helyettesítjük és így tovább. Egy vagy két ilyen közelítés rendszerint elegendő arra, hogy olyan megoldást adjon, amely meglehetősen pontos az atom élettartamához viszonyítottan kicsi időkre, de ugyanakkor nagy lehet az atom periódusaihoz képest. Az első közelítésből ugyanis

$$a_m = a_{m0} + \sum_n v_{mn} a_{n0} (1 - e^{2\pi i(W_m - W_n)t/\hbar}) / (W_m - W_n), \quad (2)$$

ahol  $a_{m0}$  az  $a_n$  kezdeti értékét jelenti; nyilvánvaló, hogy ha  $m$  és  $n$  állapot jelentősen különböző energiával rendelkezik, akkor az  $a$  amplitúdó csak kis mértékben változik az  $n$  állapotból való átmenetek következtében, az időnek periodikus függvényeként. Csak, ha két állapotnak, legyenek ezek  $m$  és  $m'$ , ugyanolyan az energiája, akkor nő az egyikük  $a_m$  amplitúdója folytonosan a másiké rovására, ahogyan ez szükséges fizikailag felismerhető átmenetekhez és a növekedési sebesség ekkor  $v_{mm'}$ -vel arányos.

A Hamilton-függvénynek a *loc. cit.* (30) egyenletében kapott kölcsönhatási tagja semmiféle olyan közvetlen szórási folyamatot nem idéz elő, amelyben egy fénykvantum egyik állapotból egy másik ugyanolyan frekvenciájú, de eltérő mozgásirányú állapotba ugrik (azaz a megfelelő mátrixelem  $v_{mm'} = 0$ ). Mégis, látszólag szórt sugárzás felléphet egy kettős folyamat révén, amelyben egy harmadik,  $n$  állapot játszik szerepet,  $m$  és  $m'$ -étől eltérő sajátenergiával. Ha kezdetben az összes  $a$ -k  $a_{m'}$  kivételével eltűnnek, akkor  $a_n$  egy  $v_{nm'}$ -vel arányos mennyiséggel gerjesztődik az  $m'$  állapotból való átmenet következtében, s habár neki mindig kicsinek kell maradnia, a számítás igazolja, hogy ez  $a_m$ -nek az idővel folytonos növekedését

\* A *loc. cit.* 6. §-ában a szerző tévesen tételezte fel, hogy a  $V_{mn}$  okozta az átmeneteket az  $m$  állapotból az  $n$  állapotba. Tehát az ott nyert, az abszorpcióra (vagy emisszióra) vonatkozó, a folyamat előtt létezett fénykvantumok számában kifejezett információkat valójában az emissziós (vagy abszorpciós) folyamat után létező fénykvantumok számára kell alkalmazni. Ez a változás persze nem érinti az eredményt (nevezetesen az Einstein-törvény bizonyítását), mert  $|V_{mn}|^2 = |V_{nm}|^2$ .

\*\* *Loc. cit.* (4) egyenlete. A jelen írásban  $\hbar$  egyszerűen a Planck-állandót jelenti (a *loc. cit.*-ben szereplő  $(2\pi)^{-1}$ -szerese helyett), mely előnyösebb akkor, ha sokat kell foglalkoznunk a  $\hbar\nu$  sugárzási energiaadaggal.



okozza egy  $v_{mn}v_{nm}$ -vel arányos sebességgel. A szórt sugárzás tehát két folyamat:  $m' \rightarrow n$  és  $n \rightarrow m$  eredményeként jelenik meg, melyek közül az egyiknek abszorpciónak, a másiknak emisszióknak kell lennie és egyikükben sem marad meg, még közelítőleg sem, a teljes sajátenergia.

A jelen írás 3. §-ában a kölcsönhatási energiára kapott pontosabb kifejezés már ad közvetlen szórési folyamatokat, melyek hatása ugyanolyan nagyságrendű, mint a kettős folyamaté és ehhez hozzá kell adni. A kettő összege éppen Kramers és Heisenberg diszperzió-képletét adja\*, ha a beeső frekvencia nem esik egybe az atom egy abszorpciós vagy emissziós vonalával. Ha viszont a beeső frekvencia egybeesik valamelyik abszorpciós vonallal, akkor a Kramers—Heisenberg-képletnek egyik tagja végtelenné válik. A jelen elmélet kimutatja, hogy ebben az esetben a szórt sugárzás két részből áll, melyek közül az egyik nagysága a kölcsönhatás kezdetétől számított idővel arányosan, a másiké pedig ezen idő négyzetével arányosan nő. Az első rész a Kramers—Heisenberg-féle képlet végesnek maradó tagjaiból származik, esetleg a végtelen tagból származó járulékkal, míg a másik, amely sokkal nagyobb, éppen az, amelyet az atom magasabb állapotába és ismét alacsonyabbba való átmeneteiből kapnánk Einstein abszorpciós és emissziós törvényei szerint.

Egy a sugárzási problémák jelen tárgyalásában felmerülő nehézségre kell itt rámutatnunk. Ha megkíséreljük kiszámítani pl. annak teljes valószínűségét, hogy egy fénykvantum adott idő alatt emittálódjék, akkor eredményül olyan összeget vagy integrált kapunk a kibocsátott fénykvantum frekvenciájára vonatkozólag, amely magasabb frekvenciáknál nem konvergens. Ez a nehézség nem az elméletben rejlő valamilyen alapvető tévedésnek tulajdonítható, hanem abból a tényből ered, hogy az atomot a mezővel való kölcsönhatása szempontjából egyszerűen váltakozó elektromos dipólusnak tekintettük, ugyanakkor a dipólus keltette, Fourier-komponenseire bontott mező a rövid hullámhosszoknál végtelen nagy energiával rendelkezik a közvetlen szomszédságában uralkodó végtelen télerősség következtében. Ha a közelítést nem úgy végezzük, hogy az atomot dipólusnak tekintjük, hanem a kölcsönhatási energia pontos kifejezését használjuk, akkor az a tény, hogy a mező szingularitása alacsonyabb nagyságrendű és állandó marad, elegendő, hogy a sort vagy az integrált konvergenssé tegye. A pontos kölcsönhatási energia túlságosan bonyolult ahhoz, hogy jelenleg a sugárzáselmélet alapjául szolgáljon és itt csak a dipólus-energiát fogjuk használni, ami azt jelenti, hogy divergens sorok is felléphetnek a számításban. Ilyen körülmények között a legjobb módszer az, hogy először tetszőleges jelenség általános elméletét dolgozzuk ki önkényesen választott  $v_{mn}$  együtthatókkal és azután a végső eredménybe ezek helyett a dipólus kölcsönhatási energiája által megszabott értékeket helyettesítjük. Ha azután úgy találjuk, hogy az összes sor konvergál, feltehető, hogy az eredmény helyes első közelítésül szolgál; ha viszont némelyik sor nem konvergál, akkor arra kell következtetnünk, hogy a dipólus-elmélet az adott speciális jelenség tárgyalására nem alkalmas. Látni fogjuk, hogy a jelenleg tárgyalt diszperzió és rezonanciasugárzás jelenségeinél nincsenek divergens sorok az első közelítésben úgy, hogy a dipólus-elmélet kielégítő. Ha viszont megpróbáljuk kiszámítani egy spektrumvonal szélességét, akkor divergens sorral találkozunk és így az atom dipóluselmélete e kérdés helyes tárgyalására feltehetően alkalmatlan.

\* Kramers és Heisenberg, Z. f. Physik, 31, 681, 1925.



## 2. § Előzetes formulák

Tekintsünk egy elektromágneses mezőt síkban polározott haladó síkhullám-összetevőkre felbontva. Minden  $r$  összetevő meghatározott frekvenciával, mozgásiránnyal és polarizáltsági állapottal rendelkezze és egy bizonyos típusú fénykvantumhoz tartozzon. (Rövidség kedvéért ezentúl feltesszük, hogy a fénykvantumra vagy a mező egy összetevőjére használt „mozgásirány” megjelölés polarizáltsági állapotát is magában foglalja és az összes mozgásirányra vonatkozó összegbe vagy integrálba beleértjük az adott mozgásirányhoz tartozó két lehetséges polarizáltsági állapotra vonatkozó összegezt. Ez kézenfekvő, mivel a két változót: a mozgásirányt és a polarizáltsági állapotot azonos módon tárgyaljuk.) Egy végtelen kiterjedésű elektromágneses mező esetén ezek a komponensek folytonos háromdimenziós halmazt képeznek. Mivel kényelmetlen lenne ezt matematikailag tárgyalni, feltesszük, hogy a kontinuum nagyszámú diszkrét komponenssel helyettesíthető. Ha a mozgásirány egységnyi térszögére, egységnyi frekvenciasávonként  $\sigma_r$  komponens esik, akkor ezeket a  $\sigma_r$ -eket az  $r$  komponens frekvenciájának és mozgásirányának tetszőleges függvényeként vehetjük, feltéve, hogy ez nagy és elegendően folytonos, és akkor azt fogjuk találni, hogy a számítások végeredménye a konkrét választástól nem függ. Ez a tény igazolni látszik azt, hogy a folytonos halmaz helyett diszkrét sorozatot használhatunk.

Kifejezhetjük  $\sigma_r$ -et  $\sigma_r = (\Delta\nu_r \Delta\omega_r)^{-1}$  alakban, ahol  $\Delta\nu_r$ -et az  $r$  komponens közelében az egymás után következett komponensek közötti frekvenciaintervallumnak tekinthetjük és ugyanígy  $\Delta\omega_r$ -et a komponenshez tartozó mozgásirány térszögének. A  $\Delta\nu_r$  és  $\Delta\omega_r$  mennyiségek lehetővé teszik az összegről az integrálra való közvetlen áttérést. Így, ha  $f_r$  az  $r$  komponens frekvenciájának és mozgásirányának valamely függvénye, amely csak kevésbé változik egyik komponenstől a szomszédosig, akkor az  $f_r \Delta\nu_r$ -ek összege az adott mozgásiránnyal bíró összes komponensre:

$$\sum_r f_r \Delta\nu_r = \int f_r d\nu_r \quad (3)$$

és az  $f_r \Delta\omega_r$ -ek összege az adott frekvenciával bíró összes komponensre

$$\sum_r f_r \Delta\omega_r = \int f_r d\omega_r, \quad (3')$$

hasonlóképpen az  $f_r (\sigma_r)^{-1}$ -ek összege minden komponensre

$$\sum_r f_r (\sigma_r)^{-1} = \sum_r f_r \Delta\nu_r \Delta\omega_r = \int f_r d\nu_r d\omega_r. \quad (3'')$$

Ha az  $s$  komponens energiakvantumainak  $N$  száma\* csak kicsit változik egyik komponenstől a szomszédosig, akkor értelmezni lehet a frekvenciasáv egységére eső sugárzás intenzitását. Feltéve, hogy a komponensek számának diszkrét volta onnan ered, hogy a sugárzás egy véges térrészbe van zárva (ami stacionárius hullámokat és egy speciális  $\sigma_s$  függvényt jelent)\*\*, akkor a területegységre, tér-

\* A loc. cit.-ben megadott szabályt, amely szerint a  $q$ -szám változók  $c$ -szám értékeit jelentő szimbólumokat vesszővel kell jelölni, nem szükséges mindig figyelembe vennünk, ha nem okoz zavart, mint a jelen esetben sem.

\*\* Loc. cit. 6. § (28) egyenlete.

szögegységre és frekvenciasávegységre eső energiaáramra kapjuk:

$$I_{\nu\omega} = N_s h\nu_s^3/c^2. \quad (4)$$

Ez olyan eredmény, amely általában tetszőleges  $\sigma_r$ -re és haladó hullámokra is fenn tartható.\*\*\* Ha csak speciális mozgásirányú komponensek gerjesztődnek, akkor az egységnyi területre és egységnyi frekvenciasávra eső energiaáramra ehelyett kapjuk:

$$I_\nu = N_s h\nu_s^3/c^3 \cdot \Delta\omega_s. \quad (5)$$

Viszont, ha csak egyetlen  $s$  komponens gerjesztődött, akkor az egységnyi területre eső energiaáram

$$I = N_s h\nu_s^3/c^2 \cdot \Delta\omega_s \Delta\nu_s = N_s h\nu_s^3/c^2 \sigma_s. \quad (6)$$

Ebben az utóbbi esetben az elektromos térerősség amplitúdójának  $E$  értékét a következő egyenlet adja:

$$E^2 = 8\pi I/c = 8\pi N_s h\nu/c^3 \sigma_s, \quad (7)$$

és a mágneses vektorpotenciál  $a$  amplitúdója, ha úgy választjuk, hogy az elektromos potenciál zérus legyen:

$$a = cE/2\pi\nu_s = 2(h\nu_s/2\pi c\sigma_s)^{1/2} N_s^{1/2}. \quad (8)$$

### 3. § A Hamilton-függvény

Most meg fogjuk határozni azt a Hamilton-függvényt, amely a *loc. cit.*-nél pontosabban írja le a mezőnek egy atommal való kölcsönhatását. Az atomot egyetlen elektrontól állónak tekintjük, amely egy  $\varphi$  potenciálú elektrosztatikus mezőben mozog. A klasszikus elmélet szerint a perturbálatlan állapotban levő atom relativisztikus egyenlete

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 - (W + e\varphi)^2/c^2 + m^2 c^2 = 0$$

és így a Hamilton-függvénye:

$$H = W = c \{ m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \}^{1/2} - e\varphi. \quad (9)$$

Ha most jelen van egy  $\kappa_x, \kappa_y, \kappa_z$  mágneses vektorpotenciállal megadott perturbáló sugárzási mező, amit úgy választunk, hogy az elektromos skalárpotenciál zérus legyen, akkor a perturbált rendszerre vonatkozó Hamilton-egyenlet:

$$\left(p_x + \frac{e}{c} \kappa_x\right)^2 + \left(p_y + \frac{e}{c} \kappa_y\right)^2 + \left(p_z + \frac{e}{c} \kappa_z\right)^2 - \frac{(W + e\varphi)^2}{c^2} + m^2 c^2 = 0,$$

amely a Hamilton-függvényre az alábbi kifejezést szolgáltatja:

$$\begin{aligned} H = W &= c \left\{ m^2 c^2 + \left(p_x + \frac{e}{c} \kappa_x\right)^2 + \left(p_y + \frac{e}{c} \kappa_y\right)^2 + \left(p_z + \frac{e}{c} \kappa_z\right)^2 \right\}^{1/2} - e\varphi = \\ &= c \{ m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + [2e/c \cdot (p_x \kappa_x + p_y \kappa_y + p_z \kappa_z) + e^2/c^2 \cdot (\kappa_x^2 + \kappa_y^2 + \kappa_z^2)] \}^{1/2} - e\varphi. \end{aligned}$$

\*\*\* Ezt az a tény igazolja, hogy az eredmény más úton is megkapható, amely nem kíván véges bezárt térrészt, nevezetesen egy kvantummechanikai gondolatmenet alkalmazásával diszkrét impulzusértékekre, a *loc. cit.* (259. oldal alsó része)-hez hasonlóan.



A négyzetgyök kifejtésében a második szögletes zárójelben levő tagot kicsinynek vesszük, majd erre a tagra vonatkozó relativisztikus korrekciókat elhanyagoljuk és így közelítőleg:

$$\begin{aligned} H &= c[m^2c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2]^{1/2} - e\varphi + e/c(\dot{x}\kappa_x + \dot{y}\kappa_y + \dot{z}\kappa_z) + e^2/2mc^2 \cdot (\kappa_x^2 + \kappa_y^2 + \kappa_z^2) = \\ &= H_0 + e/c \cdot (\dot{x}\kappa_x + \dot{y}\kappa_y + \dot{z}\kappa_z) + e^2/2mc^2 (\kappa_x^2 + \kappa_y^2 + \kappa_z^2), \end{aligned} \quad (10)$$

ahol  $H_0$  a perturbálatlan rendszerre (9)-cel megadott Hamilton-függvény. Ha a sugárzási mező dinamikus rendszerként szerepel, akkor a (10) Hamilton-függvényhez  $\Sigma N_r \lambda \nu_r$  sajátenergiáját hozzá kell adni.

A klasszikus elméletnek megfelelően a sugárzás minden  $r$  komponensére (8) szerint a mágneses vektorpotenciál

$$\kappa_r = a_r \cos 2\pi\theta_r/h = 2(h\nu_r/2\pi c\sigma_r)^{1/2} N_r^{1/2} \cos 2\pi\theta_r/h \quad (11)$$

ahol  $\theta_r$  az idővel egyenletesen növekszik úgy, hogy  $\dot{\theta}_r = h\nu_r$  és ez a változó, amelyet  $N_r$  kanonikus konjugáltjának kell tekintenünk, ha a sugárzási mezőt dinamikus rendszerként tárgyaljuk. Ennek a vektorpotenciálnak iránya megegyezik a sugárzás-komponens elektromos vektoráéval. Innen a vektorpotenciál komponensének teljes értéke bármely irányban, például az  $x$  tengely mentén:

$$\kappa_x = \Sigma_r \kappa_r \cos \alpha_{xr} = 2(h/2\pi c)^{1/2} \Sigma_r \cos \alpha_{xr} (\nu_r/\sigma_r)^{1/2} N_r^{1/2} \cos 2\pi\theta_r/h, \quad (12)$$

ahol  $\alpha_{xr}$  az  $r$  komponens elektromos vektora és az  $x$  tengely közötti szög. A kvantumelméletben, ahol az  $N_r, \theta_r$  változók  $q$  számok, a  $2N_r^{1/2} \cos 2\pi\theta_r/h$  kifejezést az  $N_r^{1/2} e^{2\pi i\theta_r/h} + (N_r+1)^{1/2} e^{-2\pi i\theta_r/h}$  valós  $q$  számmal kell helyettesíteni. Ezzel a változtatással a (10) Hamilton-függvényt át lehet vinni a kvantumelméletbe és így, a  $\Sigma N_r h\nu_r$  tagot is figyelembe véve

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \Sigma N_r h\nu_r + eh^{1/2}/(2\pi)^{1/2} c^{3/2} \cdot \Sigma_r \dot{x}_r (\nu_r/\sigma_r)^{1/2} [N_r^{1/2} e^{2\pi i\theta_r/h} + (N_r+1)^{1/2} e^{-2\pi i\theta_r/h}] + \\ &+ e^2 h/4\pi mc^3 \cdot \Sigma_{r,s} \cos \alpha_{rs} (\nu_r \nu_s / \sigma_r \sigma_s)^{1/2} [N_r^{1/2} e^{2\pi i\theta_r/h} + (N_r+1)^{1/2} e^{-2\pi i\theta_r/h}] \times \\ &\times [N_s^{1/2} e^{2\pi i\theta_s/h} + (N_s+1)^{1/2} e^{-2\pi i\theta_s/h}] \end{aligned} \quad (13)$$

ahol  $x_r$  az  $(x, y, z)$  vektornak az  $r$  komponens elektromos vektorának irányába eső komponensét jelenti, azaz

$$x_r = x \cos \alpha_{xr} + y \cos \alpha_{yr} + z \cos \alpha_{zr}$$

és  $\alpha_{rs}$  az  $r$  és  $s$  komponens elektromos vektorai közötti szög, tehát

$$\cos \alpha_{rs} = \cos \alpha_{xr} \cos \alpha_{xs} + \cos \alpha_{yr} \cos \alpha_{ys} + \cos \alpha_{zr} \cos \alpha_{zs}.$$

A (13) első sorában levő tagok éppen azok, melyeket a *loc. cit.* (30) egyenletében kaptunk és csak emissziós és abszorpciós folyamatokat idéznek elő. A megmaradó (azaz a kettős összegzésben szereplő) tagokat a *loc. cit.*-ben elhanyagoltuk. Ezeket a tagokat három csoportba lehet osztani:

(i) Azok a tagok, amelyek függetlenek a  $\theta$ -któl és a  $H_0 + \Sigma N_r \hbar \nu_r$  sajátenergiához adhatók. Mind e tagok összege, amely csak az  $r=s$  esetből adódik:

$$e^2 \hbar / 4\pi m c^3 \cdot \Sigma_r \nu_r / \sigma_r \cdot [N_r^{1/2} e^{2\pi i \theta_r / \hbar} (N_r + 1)^{1/2} e^{-2\pi i \theta_r / \hbar} + (N_r + 1)^{1/2} e^{-2\pi i \theta_r / \hbar} N_r^{1/2} e^{2\pi i \theta_r / \hbar}] = \\ = e^2 \hbar / 4\pi m c^3 \cdot \Sigma_r \nu_r / \sigma_r \cdot (2N_r + 1).$$

Az  $e^2 \hbar / 4\pi m c^3 \cdot \Sigma \nu_r / \sigma_r \cdot 2N_r$  tagok elhanyagolhatók a  $\Sigma N_r \hbar \nu_r$  taghoz képest, a nevezőben levő  $\sigma_r$ -ek tetemes nagyságának következtében, míg az  $e^2 \hbar / 4\pi m c^3 \cdot \Sigma \nu_r / \sigma_r$  tagokat azért nem kell figyelembe venni, mert nem tartalmaznak egyetlen dinamikus változót sem, annak a ténynek ellenére, hogy a  $\Sigma \nu_r / \sigma_r$  összeg — amely (3'') szerint egyenlő az  $\int \nu_r d\nu_r d\omega_r$  integrállal — magas frekvenciákra nem konvergens.

(ii) Az  $e^{2\pi i (\theta_r - \theta_s) / \hbar}$  ( $r \neq s$ ) alakú tényezőt tartalmazó tagok, melyek összege:

$$e^2 \hbar / 4\pi m c^3 \Sigma_r \Sigma_{s \neq r} \cos \alpha_{rs} (\nu_r \nu_s / \sigma_r \sigma_s)^{1/2} [N_r^{1/2} (N_s + 1)^{1/2} e^{2\pi i (\theta_r - \theta_s) / \hbar} + \\ + (N_r + 1)^{1/2} N_s^{1/2} e^{-2\pi i (\theta_r - \theta_s) / \hbar}] = \quad (14) \\ = e^2 \hbar / 2\pi m e^3 \Sigma_r \Sigma_{s \neq r} \cos \alpha_{rs} (\nu_r \nu_s / \sigma_r \sigma_s)^{1/2} N_r^{1/2} (N_s + 1)^{1/2} e^{2\pi i (\theta_r - \theta_s) / \hbar}.$$

Ezek a tagok fontosak egyedül a három csoportból, mivel olyan átmenetekre vezetnek, amelyben egy fénykvantum  $s$  állapotból közvetlenül az  $r$  állapotba ugrik. Az ilyen átmeneteket igazi szórás folyamatoknak nevezhetjük, megkülönböztetésül az 1. §-ban leírt kettős szórás folyamatoktól.

(iii) A többi tag, melyek mindegyike az  $e^{\pm 4\pi i \theta_r / \hbar}$ , vagy  $e^{\pm 2\pi i (\theta_r + \theta_s) / \hbar}$  alakú tényezők egyikét tartalmazza. Ezek az egyidejűleg két fénykvantumot emittáló vagy abszorbeáló folyamatoknak megfelelő tagok olyan fénykvantumelméletben, ahol a fénykvantumok között nem működnek erők, nem léphetnek fel. Mivel e tagok hatásai elhanyagolhatók, az eltérés a fénykvantumelmélettől nem számottevő.

#### 4. § Az emisszió és a valódi szórás folyamatok vizsgálata

Vizsgáljuk meg az egyszerű emissziós folyamatnál felmerülő divergens integrált. Tegyük fel, hogy egy  $r$  állapotú fénykvantum emittálódik az atomnak  $J=J'$  állapotából a  $J=J''$  állapotába való ugrásával egyidejűleg. Ha  $m$ -mel jelöljük a teljes atom + mező rendszer végső állapotát és  $k$ -val a kezdeti állapotot, akkor első közelítésben a végső állapot sajátfüggvényének  $a_m$  amplitúdója  $t$  időpontban

$$a_m = v_{mk} (1 - e^{2\pi i (W_n - W_k) t / \hbar}) / (W_m - W_k). \quad (15)$$

Ezt úgy kaptuk meg, hogy a (2) egyenletbe  $a_{k0}=1$ ,  $a_{k0}=0$  ( $n \neq k$ ) értékeket írtunk. A (13) Hamilton-operátor egyetlen olyan tagja, amely a  $v_{mk}$  mátrixelemhez hozzájárulhat, az, amely az  $e^{2\pi i \theta_r / \hbar}$  tényezőt tartalmazza. Ennek ( $J''$ ,  $N'_1$ ,  $N'_2$ , ...,  $N'_r + 1$ ...;  $J'$ ,  $N'_1$ ,  $N'_2$ , ...,  $N'_r$ ...) mátrixeleme:  $ch^{1/2} / (2\pi)^{1/2} c^{3/2} \cdot \dot{x}_r (J'' J') (\nu_r / \sigma_r)^{1/2} \cdot (N'_r + 1)$ , ahol  $\dot{x}_r (J'' J')$  az  $\dot{x}_r$  közönséges ( $J'' J'$ ) mátrixeleme. Ha nincs semmi beeső sugárzás, minden  $N'$ -t zérónak kell tekinteni, ahonnan következik

$$v_{mk} = ch^{1/2} / (2\pi)^{1/2} c^{3/2} \cdot \dot{x}_r (J'' J') (\nu_r / \sigma_r)^{1/2}$$

ugyanakkor

$$W_k = H_0(J') \quad W_m = H_0(J'') + \hbar \nu_r.$$



Így

$$W_m - W_k = H_0(J'') + h\nu_r - H_0(J') = h[\nu_r - \nu(J'J'')],$$

ahol  $\nu(J'J'') = [H_0(J') - H_0(J'')]/h$  a  $J'$  és  $J''$  állapotok közötti átmeneti frekvencia, ha  $J'$ -t tételezzük fel magasabbnak. Innen a (15)-ből:

$$|a_m|^2 = \frac{e^2}{\pi\hbar c^3} |\dot{x}_r(J'J'')|^2 \frac{\nu_r}{\sigma_r} \frac{1 - \cos 2\pi[\nu_r - \nu(J'J'')]t}{[\nu_r - \nu(J'J'')]^2}.$$

Avégből, hogy megkapjuk annak teljes valószínűségét, hogy valamely fénykvantum  $r$  mozgásiránya körül  $\delta\omega$  térszögben emittálódik az atomnak ezzel az ugrásával, meg kell szoroznunk  $|a_m|^2$ -et  $\delta\omega/\Delta\omega_r$ -vel és az összes frekvenciára összegeznünk. Ekkor (3) felhasználásával kapjuk:

$$\delta\omega \Sigma_v \frac{|a_m|^2}{\Delta\omega_r} = \delta\omega \frac{e^2}{\pi\hbar c^3} |\dot{x}_r(J'J'')|^2 \int_0^\infty \nu_r d\nu_r \frac{1 - \cos 2\pi[\nu_r - \nu(J'J'')]t}{[\nu_r - \nu(J'J'')]^2}. \quad (16)$$

Az integrál nagy frekvenciákra nem konvergál. Ez annak tulajdonítható, hogy amint az 1. §-ban említettük, az atomnak jogosulatlanul csak a dipólushatását vesszük figyelembe azáltal, hogy a (10) egyenletbe a mágneses potenciál (12)-vel megadott értékét helyettesítjük; ez egy bizonyos rögzített pontban, például a magban felvett érték az elektron helyén pillanatnyilag felvett érték helyett. Hogy pontosan megkapjuk a kölcsönhatási energiát, a (11)-be  $\cos 2\pi\theta_r/h$  helyett  $\cos 2\pi[\theta_r/h - \nu_r \xi_r/c]$ -t kell tennünk, ahol  $\xi_r$  az  $(x, y, z)$  vektor összetevője a sugárzás  $r$  komponensének a mozgásirányba. Ez alacsony  $\nu_r$  frekvenciákra nem ad lényeges eltérést, de (13) együtthatóiban egy új tényező:  $\cos 2\pi\nu_r \xi_r/c$  vagy  $\sin 2\pi\nu_r \xi_r/c$  megjelenését vonja maga után, melynek mátrixelemei zéróhoz tartanak, ha  $\nu_r$  a végtelenhez tart. Valószínűleg ez eredményezi majd korrigálás után (16)-ban az integrál konvergenciáját, minthogy korrigálatlanul divergenciája csupán logaritmikus.

Feltéve, hogy (16)-ban az integranduszt nagy frekvenciákon megfelelően módosítottuk, világos, hogy az atom periódusához viszonyítva nagy (de a közelítés érvényessége érdekében az atom élettartamához kicsi)  $t$  értékekre gyakorlatilag az egész integrált  $\nu(J'J'')$ -höz közel eső  $\nu_r$  értékek határozzák meg. Ez fizikailag azt jelenti, hogy csak az átmeneti frekvenciához közel eső sugárzás emittálódhat spontán. Az integrált elvégezve

$$\delta\omega e^2/\pi\hbar c^3 \cdot |\dot{x}_r(J'J'')|^2 \cdot 2\pi^2 t \nu(J'J'')$$

adja az emisszió teljes valószínűségét, mely az Einstein-féle egységnyi térszögre vonatkozó  $A$  együttható helyes értékéhez vezet, nevezetesen:

$$2\pi e^2/\hbar c^3 \cdot |\dot{x}_r(J'J'')|^2 \nu(J'J'') = 8\pi^3 e^2/\hbar c^3 \cdot |x_r(J'J'')|^2 \nu^3(J'J'').$$

Most meghatározzuk a Hamilton-operátor (14) tagjaival kapcsolatos igazi szórás folyamatok időegységre eső számát. Azonnal látható, hogy e folyamatok bekövetkezésének gyakorisága független az atom természetétől, tehát ugyanaz akár kötött, akár szabad elektron esetében. A valódi szórás az egyetlen, amely egy szabad elektronon bekövetkezik, s így várható, hogy a (14) tagok a szabad elektron okozta sugárzás-szórás helyes képletéhez vezetnek, a relativisztikus mechanika és így a Compton-effektus elhanyagolásával.

Tegyük fel, hogy az atom kezdetben  $J'$  állapotban van és az összes  $N$  eltűnik az egyik kivételével, melynek értéke  $N'_s$ . Jelöljük ezt az állapotot az egész rendszerre vonatkozólag  $k$ -val, és azt az állapotot, amelyre  $J=J'$  és  $N_s=N'_s-1$ ,  $N_r=1$ , a többi  $N$  eltűnik, jelöljük  $m$ -mel. Az első közelítésben  $a_m$ -t ismét (15) adja meg, ahol most

$$v_{mk} = e^2 h / 2\pi m c^3 \cdot \cos \alpha_{rs} (v_r v_s / \sigma_r \sigma_s)^{1/2} N_s'^{1/2} \quad (17)$$

$$W_k = H_0(J') + N'_s h v_s, \quad W_m = H_0(J') + (N'_s - 1) h v_s + h v_r. \quad (18)$$

Tehát

$$W_m - W_k = h(v_r - v_s) \quad (19)$$

és innen

$$|a_m|^2 = \frac{e^4}{2\pi^2 m^2 c^6} \cos^2 \alpha_{rs} \frac{v_r v_s}{\sigma_r \sigma_s} \cdot N_s' \frac{1 - \cos 2\pi(v_r - v_s)t}{(v_r - v_s)^2}.$$

Avégből, hogy megkapjuk annak teljes valószínűségét, hogy egy fénykvantum a  $\delta\omega$  térszögbe essék,  $|a_m|^2$ -t, úgy mint előbb, meg kell szorozni  $\delta\omega/\Delta\omega_r$ -vel és összegezni minden  $v_r$  frekvenciára; ekkor kapjuk, hogy\*

$$\delta\omega \Sigma_v \frac{|a_m|^2}{\Delta\omega_r} = \delta\omega \frac{e^4 \cos^2 \alpha_{rs}}{2\pi^2 m^2 c^6} \frac{v_s}{\sigma_v} N_s' \int v_r dv_r \frac{1 - \cos 2\pi(v_r - v_s)t}{(v_r - v_s)^2}. \quad (20)$$

Ismét az előbbi alakú divergens integrált kaptuk, melyről feltehető, hogy a pontosabb elméletben konvergenssé válik. Gyakorlatilag most az egész integrált a  $v_s$ -hez közeli  $v_r$  értékek határozzák meg s a szórási folyamat teljes valószínűsége a (4) egyenlet alapján

$$\delta\omega \frac{e^4 \cos^2 \alpha_{rs}}{2\pi^2 m^2 c^6} \frac{v_s}{\sigma_s} N_s' \cdot 2\pi^2 t v_s = \delta\omega \frac{e^4}{h m^2 c^4 v_s} \cos^2 \alpha_{rs} \cdot t I,$$

ahol  $I$  a beeső energiaáram sűrűsége. Az időegység alatt egységnyi térszögbe szórt energia tehát

$$e^4/m^2 c^4, \quad \cos^2 \alpha_{rs} I,$$

ahol  $\alpha_{rs}$  a beeső és a szórt sugárzás elektromos vektorai közötti szög, visszakaptuk tehát a pontos klasszikus képletet.

## 5. § A diszperzió elmélete

Most az (1) egyenletek megoldásának második közelítését számítjuk ki, azt az esetet véve, amikor a rendszer kezdetben  $k$  állapotban van úgy, hogy a (2)-vel megadott első közelítés, ha  $a_{n0} = \delta_{nk}$ , az alábbira redukálódik:

$$a_m = \delta_{mk} + v_{mk} (1 - e^{2\pi i (W_m - W_k)t/h}) / (W_m - W_k).$$

\* Annak oka, hogy a  $v_r$  szórt frekvencia kis valószínűséggel véges mennyiséggel eltérhet a  $v_s$  beeső frekvenciától, az, hogy a szórt sugárzást Fourier-komponenseire bontva véges  $t$  ideig tartó szórási folyamat után vizsgáljuk. A (20) képletből látható, hogy amint  $t$  idő növekszik, a szórt sugárzás mindinkább monokromatikusabbá válik a  $v_s$  beeső frekvenciával. Ha a Schrödinger-egyenletnek az állandó fizikai feltételekhez igazodó periodikus megoldását íránk fel, akkor azt tapasztalánk, hogy a szórt frekvencia pontosan egyenlő a beeső frekvenciával.



Ha ezeket az értékeket (1) jobboldalán az  $a_n$ -ekbe helyettesítjük, akkor kapjuk, hogy

$$ih/2\pi\dot{a}_m = v_{mk}e^{2\pi i(W_m - W_k)t/h} + \sum_n v_{mn}v_{nk}(1 - e^{2\pi i(W_n - W_k)t/h})e^{2\pi i(W_m - W_n)t/h}/(W_n - W_k) =$$

$$= \left(v_{mk} - \sum_n \frac{v_{mn}v_{nk}}{W_n - W_k}\right)e^{2\pi i(W_m - W_k)t/h} + \sum_n \frac{v_{mn}v_{nk}}{W_n - W_k}e^{2\pi i(W_m - W_n)t/h},$$

és innen, ha  $m \neq k$ ,

$$a_m = \left(v_{mk} - \sum_n \frac{v_{mn}v_{nk}}{W_n - W_k}\right) \frac{1 - e^{2\pi i(W_m - W_k)t/h}}{W_m - W_k} + \sum_n \frac{v_{mn}v_{nk}}{W_n - W_k} \frac{1 - e^{2\pi i(W_m - W_n)t/h}}{W_m - W_n}. \quad (21)$$

A perturbáló energia  $v_{mn}$  átlós elemeit nulláknak tekinthetjük, mivel ha nem lennének azok, akkor a  $W$  sajátenergiába lennének befoglalhatók. Így nem lesz (21)-ben eltűnő nevezőjű tag, feltéve, hogy az összes energiaszint különböző.

Tegyük fel, hogy az  $m$  sajátenergiája egyenlő a  $k$  kezdeti állapotéval. Akkor a (21) jobboldalán az első tag időbeli periodicitása megszűnik és kapjuk:

$$\{v_{mk} - \sum_n v_{mn}v_{nk}/(W_n - W_k)\}2\pi t/ih,$$

ez az idővel lineárisan nő. A növekedési sebesség a következő tagokból áll: egy  $v_{mk}$ -val arányos részből, amely a  $k$  állapotból való közvetlen átmenetnek tulajdonítható, továbbá olyan részek összegéből, amelyek mindegyike  $v_{mn}v_{nk}$ -val arányos és olyan átmeneteknek tulajdonítható, melyek  $k$ -ból  $n$ -be, majd  $n$ -ből  $m$ -be történnek úgy, hogy a közbenső állapot sajátfüggvényének  $a_n$  amplitúdója mindig kicsi marad.

Amikor az elméletet alkalmazzuk a sugárzás szóródására, akkor nem egyetlen, a kezdeti állapotéval pontosan megegyező sajátenergiájú végső állapotot kell tekintetbe venni, hanem a végső állapotoknak egy sorozatát, a kezdeti sajátenergia körüli energiával, megfelelően az előforduló összes lehetséges, különböző frekvenciájú, de azonos mozgásirányú szórt fénykvantumnak. Annak teljes valószínűsége, hogy a rendszer e végső állapotok valamelyikében legyen,

$$\sum |a_m|^2 = \int (\Delta W_m)^{-1} |a_m|^2 dW_m,$$

ahol  $\Delta W_m$  az energiaszintek közti intervallum. Az  $a_m$  (21) kifejezésében a második tag elhanyagolható, mivel mindig kicsi marad (a rezonancia esetét kivéve, amelyet később tárgyalunk) és így

$$\sum |a_m|^2 = \int \left| v_{mk} - \sum_n \frac{v_{mn}v_{nk}}{W_n - W_k} \right|^2 \frac{2[1 - \cos 2\pi(W_m - W_k)t/h]}{\Delta W_m \cdot (W_m - W_k)^2} dW_m.$$

Ha feltesszük, hogy az integrál konvergens, úgy, hogy  $t$  nagy értékeinél gyakorlatilag az egészet  $W_k$ -hoz közelfekvő  $W_m$  értékek határozzák meg, akkor

$$\sum |a_m|^2 = \frac{4\pi^2 t}{h \Delta W_m} \cdot \left| v_{mk} - \sum_n \frac{v_{mn}v_{nk}}{W_n - W_k} \right|^2, \quad (22)$$

ahol a jobboldali mennyiségek arra a végső állapotra vonatkoznak, amely pontosan a kezdeti sajátenergiával rendelkezik.

A  $k$  és  $m$  állapotokat ugyanazoknak vesszük, mint az előbbi fejezetben tárgyalt valódi szórási folyamatban és így a (17), (18) és (19) egyenletek továbbra is fennállanak és  $\Delta W_m = h\Delta v_r = h/\sigma_r \Delta\omega_r$ . Mármint az  $n$  állapotot tekinthetjük úgy, hogy abban  $J=J''$ ,  $N_s=N'_s-1$ ,  $N_t=0$  ( $t \neq s$ ), tetszőleges  $J''$ -vel, amikor is a  $k \rightarrow n$  folyamat egy  $s$  kvantum elnyelésével és az  $n \rightarrow m$  folyamat egy  $r$  kvantum kibocsátásával jár; vagy pedig  $J=J''$ ,  $N_s=N'_s$ ,  $N_r=1$ ,  $N_t=0$  ( $t \neq s, r$ ), amikor  $k \rightarrow n$  emisszió és  $n \rightarrow m$  abszorpció. Az első esetben:

$$v_{nk} = \frac{e}{c} \left( \frac{h\nu}{2\pi c\sigma_s} \right)^{1/2} \cdot \dot{x}_s(J''J') N_s'^{1/2}, \quad v_{mn} = \frac{e}{c} \left( \frac{h\nu_r}{2\pi c\sigma_r} \right)^{1/2} \cdot \dot{x}_r(J'J'')$$

és

$$W_n = H_0(J'') + (N'_s - 1)h\nu_s \quad W_n - W_k = h[\nu(J''J') - \nu_s],^*$$

és a második esetben

$$v_{nk} = \frac{e}{c} \left( \frac{h\nu_r}{2\pi c\sigma_r} \right)^{1/2} \dot{x}_r(J''J') \quad v_{mn} = \frac{e}{c} \left( \frac{h\nu_s}{2\pi c\sigma_s} \right)^{1/2} \dot{x}_s(J'J'') N_s'^{1/2}$$

és

$$W_n = H_0(J'') + N'_s h\nu_s + h\nu_r, \quad W_n - W_k = h[\nu(J''J') + \nu_r].$$

A többi lehetséges  $n$  állapotot el fogjuk hanyagolni, nevezetesen azokat, amelyekre a  $v_{mn}$ ,  $v_{nk}$  mátrixelemek a (13) Hamilton-operátorban a kettős összegezésből származnak, mivel ezekben a kifejezésekben csak az elsőrendű tagokig számolunk. (Csak az emissziós és abszorpciós tagokban számolunk a másodrendig, amely meg egyezik — mint látni fogjuk — a kettős összegezés tagjaiban az első renddel.) A (22) jobb oldalára, ahol  $v_r = v_s$ -t kell vennünk, kapjuk:

$$N'_s t \Delta\omega_r \frac{e^4 v_s^2}{h^2 c^6 \sigma_s} \left| \frac{h}{m} \cos \alpha_{rs} - \Sigma_{J''} \left\{ \frac{\dot{x}_r(J'J'') \dot{x}_s(J''J')}{\nu(J''J') - \nu_s} + \frac{\dot{x}_s(J'J'') \dot{x}_r(J''J')}{\nu(J''J') + \nu_s} \right\} \right|^2. \quad (23)$$

Ennek az eredménynek legmegfelelőbb kifejezési módja: megkeressük annak a  $\nu_s$  frekvenciájú rezgő dipólusnak elektromos dipólnyomatéka  $P$  amplitúdóját (vektor), amely a klasszikus elméletnek megfelelően ugyanazt a sugárzási eloszlást bocsátaná ki, mint amit az atom ténylegesen szórt. A  $P$  dipólus által  $t$  idő alatt egységnyi térszögben kibocsátott  $r$  típusú ( $\nu_r = \nu_s$ ) fénykvantumok száma

$$2\pi^3 \nu_s^3 / hc^3 \cdot P_r t,$$

ahol  $P_r$  a  $P$ -nek az  $r$  fénykvantum elektromos vektorának irányába eső összetevője. Ezt összevetve (23)-mal (melyet előbb  $\Delta\omega_r$ -val osztanunk kell, hogy egy fénykvantum egységnyi térszögre eső szórási valószínűségét kapjuk), felhasználva (7)-et, adódik:

$$P_r = \left( \frac{8\pi N'_s}{hc^3 \nu_s \sigma_s} \right)^{1/2} \frac{e^2}{4\pi^2} \left| \frac{h}{m} \cos \alpha_{rs} - \Sigma_{J''} \left\{ \frac{\dot{x}_r(J'J'') \dot{x}_s(J''J')}{\nu(J''J') - \nu_s} + \frac{\dot{x}_s(J'J'') \dot{x}_r(J''J')}{\nu(J''J') + \nu_s} \right\} \right| = \quad (24)$$

$$= E \frac{e^2}{h} \frac{1}{\nu_s^2} \left| \frac{h}{4\pi^2 m} \cos \alpha_{rs} - \Sigma_{J''} [\nu(J''J')]^2 \left\{ \frac{x_r(J'J'') x_s(J''J')}{\nu(J''J') - \nu_s} + \frac{x_s(J'J'') x_r(J''J')}{\nu(J''J') + \nu_s} \right\} \right|,$$

ahol  $E$  a beeső sugárzás elektromos vektorának amplitúdója.

\* A  $\nu(J''J')$  frekvencia nem szükségképpen pozitív.



Ezt az eredményt más alakra is hozhatjuk, ha felhasználjuk a kvantumfeltételekből következő alábbi összefüggéseket:

$$\Sigma_{J''} [x_r(J' J'') x_s(J'' J') - x_s(J' J'') x_r(J'' J')] = [x_r x_s - x_s x_r](J' J') = 0 \quad (25)$$

és

$$\Sigma_{J''} [x_r(J' J'') \dot{x}_s(J'' J') - \dot{x}_s(J' J'') x_r(J'' J')] = [x_r \dot{x}_s - \dot{x}_s x_r](J' J') = i\hbar/2\pi m \cdot \cos \alpha_{rs} \quad (26)$$

ahonnan

$$\Sigma_{J''} [x_r(J' J'') x_s(J'' J') v(J'' J') + x_s(J' J'') x_r(J'' J') v(J'' J')] = \hbar/4\pi^2 m \cdot \cos \alpha_{rs}. \quad (27)$$

Megszorozva (25)-öt  $v_s$ -sel és (27)-hez adva, nyerjük

$$\Sigma_{J''} [x_r(J' J'') x_r(J'' J') \{v(J'' J') + v_s\} + x_s(J' J'') x_r(J'' J') \{v(J'' J') - v_s\}] = \hbar/4\pi^2 m \cos \alpha_{rs}. \quad (28)$$

Ennek az egyenletnek segítségével (24)

$$P_r = E \frac{e^2}{\hbar} \left| \Sigma_{J''} \left\{ \frac{x_r(J' J'') x_s(J'' J')}{v(J'' J') - v_s} + \frac{x_s(J' J'') x_r(J'' J')}{v(J'' J') + v_s} \right\} \right|$$

alakot ölti úgy, hogy a  $P$  vektor:

$$P = E \frac{e^2}{\hbar} \left| \Sigma_{J''} \left\{ \frac{x(J' J'') x_s(J'' J')}{v(J'' J') - v_s} + \frac{x_s(J' J'') x(J'' J')}{v(J'' J') + v_s} \right\} \right|, \quad (29)$$

ahol az index nélküli  $x$  az  $(x, y, z)$  vektort jelenti. Ez azonos Kramers és Heisenberg eredményével.\*

A (22) formula alkalmazásánál ahelyett, hogy a rendszer végső  $m$  állapotát olyanak vegyük, ahol az atom ismét a kezdeti  $J=J'$  állapotába jut, vehetünk az atom számára egy új állapotot, például  $J=J''$ -t. A sugárzás  $v_r$  frekvenciája, amely a teljes sajátenergiában semmilyen változást nem ad, most:

$$v_r = v_s - v(J'' J') = v_s + v(J'' J'') - v(J'' J'), \quad (30)$$

ez eltér a  $v_s$  beeső frekvenciától és így a nem koherens szórt sugárzást kapjuk. (Feltesszük, hogy ez a  $v_r$  pozitív, mert különben nem volna az atom  $J=J''$  végső állapotával kapcsolatos semmiféle nem-koherens szórt sugárzás.) A jelen esetben  $v_{mk}=0$ , megfelelően annak a ténynek, hogy valódi szórás folyamat nem idéz elő nem-koherens sugárzást.  $P_r$ -re (24) egyenlet levezetéséhez hasonló és majdnem azonos számítás után kapjuk:

$$P_r = E \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{v_r v_s} \left| \Sigma_{J''} v(J'' J') v(J'' J'') \left\{ \frac{x_r(J'' J'') x_s(J'' J')}{v(J'' J') - v_s} + \frac{x_s(J'' J'') x_r(J'' J')}{v(J'' J') + v_r} \right\} \right|. \quad (31)$$

Ezt az eredményt a (29)-nek megfelelő alakra hozhatjuk a (25) és (26)-hoz hasonló egyenletek segítségével, melyek  $[x_r x_s - x_s x_r]$  és  $[x_r \dot{x}_s - \dot{x}_s x_r]$  nem diago-

\* Kramers és Heisenberg, loc. cit. (18) egyenlete. A diszperziós képlet előző kvantumelméleti levezetését lásd Born, Heisenberg és Jordan, Z. f. Physik 35, 557, I. fejezet (40) egyenlete, (1926); Schrödinger, loc. cit. 2. §, (23) egyenlet; Klein, loc. cit. 5. §, (82) egyenlet.

nális  $(J''' J')$  mátrixelemeire vonatkoznak. Ezekből az egyenletekből (28)-nak megfelelően következik

$$\Sigma_{J''} [x_r(J''' J'') x_s(J'' J') \{v(J'' J') + v_r\} + x_s(J''' J'') x_r(J'' J') \{v(J'' J''') - v_r\}] = 0.$$

Ha ennek az egyenletnek bal oldalát a (31)-ben szereplő összegből kivonjuk és tekintetbe vesszük az

$$v(J'' J') v(J'' J''') = v(J'' J') [v(J'' J') + v_r - v_s] = [v(J'' J') - v_s] [v(J'' J') + v_r] + v_r v_s$$

és

$$v(J'' J') v(J'' J''') = [v(J'' J''') - v_r] [v(J'' J' + v_r) + v_r v_s]$$

összefüggéseket, amelyek (30)-ból következnek, akkor az alábbi eredményt kapjuk:

$$P_r = E \frac{e^2}{h} \left| \Sigma_{J''} \left\{ \frac{x_r(J''' J'') x_s(J'' J')}{v(J'' J') - v_s} + \frac{x_s(J''' J'') x_r(J'' J')}{v(J'' J') + v_r} \right\} \right|,$$

ismét *Kramers*-szel és *Heisenberg*-gel megegyezően.

## 6. § A rezonancia esete

Az előző fejezetben kapott szórás formulák nem tarthatók fenn, ha a beeső sugárzás frekvenciája az atom egyik abszorpció vagy emissziós vonalával egybeesik, mert ekkor az egyik nevező zérussá válna. Könnyen észrevehető, hogy a formulák levezetése hol szorul módosításra. Mivel a közbenső  $n$  állapotok egyikének ugyanaz az energiája, mint a kezdeti  $k$  állapotnak, a (21)-ben a második összeg idevonatkozó tagja naggyá válik és többé nem hanyagolható el.

Ezt a rezonancia-esetet tanulmányozva fel kell tennünk általában, hogy a beeső sugárzás a rezonancia-frekvenciát magában foglaló frekvenciasávú fénykvantum-eloszlásból áll, ahelyett, hogy csupán egyetlen adott frekvenciájú fénykvantumokból állana. Az eredmények ugyanis nagymértékben attól függenek majd, hogy mennyire megközelítően monokromatikus a beeső sugárzás. A rendszer kezdeti állapotát adják meg a  $J=J'$  és  $N_s=N'_s$  egyenlőségek, ahol  $N'_s$  nullával egyenlő, kivéve bizonyos rögzített irányú fénykvantumok esetét, amikor durván szólva a frekvencia folytonos függvénye úgy, hogy a beeső energia egységnyi felületre, egységnyi frekvenciasávra eső áramát (5) adja meg. A végső  $m$  állapot egy koherens szórás folyamat esetén ismét olyan, amelyre  $J=J'$  és egy  $s$  fénykvantum abszorbeálódott, egy megközelítően ugyanolyan frekvenciájú  $r$  fénykvantum emittálódott. Tehát kapjuk

$$W_m - W_k = h(v_r - v_s). \quad (32)$$

Amint előbb a közbenső  $n$  állapotok azok lesznek, amelyekre  $J=J''$  (önkényes) és már vagy az  $s$  kvantum abszorbeálódott, vagy az  $r$  kvantum emittálódott. Ha a konkretizálás céljából azt az esetet tekintjük, amikor a beeső frekvenciák sorozata egyetlen rezonáló frekvenciát tartalmaz és ez az atom, mondjuk,  $J=J^I$  állapotához tartozó abszorpció frekvencia, akkor a rendszernek az a közbülső állapota, amelyre  $J=J^I$  és amelynél az  $s$  kvantum már abszorbeálódott, nagyon közel



ugyanazon sajátenergiával rendelkezik, mint a kezdeti állapot. E közbülső állapotot  $l$ -nek nevezve kapjuk

$$W_l - W_k = h(\nu_0 - \nu_s) \quad W_m - W_l = h(\nu_r - \nu_0), \quad (33)$$

ahol  $\nu_0$  a rezonancia-frekvencia, amely  $[H(J^l) - H(J')]/h$ .

A (21) egyenletben most a második összegnek csak azokat a tagjait hanyagolhatjuk el, amelyekre  $n \neq l$ . Eszerint

$$a_m = \left( v_{mk} - \sum_{n \neq l} \frac{v_{mn} v_{nk}}{W_n - W_k} \right) \frac{1 - e^{2\pi i (W_m - W_k) t/h}}{W_m - W_k} + \\ + \frac{v_{ml} v_{lk}}{W_l - W_k} \left\{ \frac{1 - e^{2\pi i (W_m - W_l) t/h}}{W_m - W_l} - \frac{1 - e^{2\pi i (W_m - W_k) t/h}}{W_m - W_k} \right\},$$

amely (32) és (33) felhasználásával így írható:

$$a_m = \left( v_{mk} - \sum_{n \neq l} \frac{v_{mn} v_{nk}}{W_n - W_k} \right) \frac{1 - e^{2\pi i (\nu_r - \nu_s) t}}{h(\nu_r - \nu_s)} + \\ + \frac{v_{ml} v_{lk}}{h^2(\nu_0 - \nu_s)} \left\{ \frac{1 - e^{2\pi i (\nu_r - \nu_0) t}}{\nu_r - \nu_0} - \frac{1 - e^{2\pi i (\nu_r - \nu_s) t}}{\nu_r - \nu_s} \right\}.$$

Most meghatározzuk annak teljes valószínűségét, hogy bármelyik beeső  $s$  fénykvantum elnyelésére speciális  $r$  fénykvantum emittálódjék. Ezt a  $\sum \nu_s |a_m|^2$  összeg, azaz a vele egyenlő  $\int (\Delta \nu_s)^{-1} |a_m|^2 d\nu_s$  adja meg. Ennek kiértékeléséhez az alábbi integrálok szükségesek:

$$\int_0^\infty \frac{|1 - e^{2\pi i (\nu_r - \nu_s) t}|^2}{(\nu_r - \nu_s)^2} d\nu_s = 4\pi^2 t \\ \int_0^\infty \frac{1}{(\nu_0 - \nu_s)^2} \left| \frac{1 - e^{2\pi i (\nu_r - \nu_0) t}}{\nu_r - \nu_0} - \frac{1 - e^{2\pi i (\nu_r - \nu_s) t}}{\nu_r - \nu_s} \right|^2 d\nu_s = 4\pi \frac{2\pi(\nu_r - \nu_0)t - \sin 2\pi(\nu_r - \nu_0)t}{(\nu_r - \nu_0)^3} \\ \int_0^\infty \frac{1 - e^{2\pi i (\nu_r - \nu_s) t}}{(\nu_r - \nu_s)(\nu_0 - \nu_s)} \left\{ \frac{1 - e^{2\pi i (\nu_r - \nu_s) t}}{\nu_r - \nu_0} - \frac{1 - e^{2\pi i (\nu_r - \nu_s) t}}{\nu_r - \nu_s} \right\} d\nu_s = \\ = 2\pi \left\{ \frac{2\pi(\nu_r - \nu_0)t - \sin 2\pi(\nu_r - \nu_0)t}{(\nu_r - \nu_0)^2} + i \frac{1 - \cos 2\pi(\nu_r - \nu_0)t}{(\nu_r - \nu_0)^2} \right\},$$

ezek felhasználásával nagy  $t$  értékekre kapjuk:

$$\sum \nu_s |a_m|^2 = \left| v_{mk} - \sum_{n \neq l} \frac{v_{mn} v_{nk}}{W_n - W_k} \right|^2 \frac{4\pi^2 t}{h^2 \Delta \nu_s} + \frac{|v_{ml} v_{lk}|^2}{h^4} \frac{4\pi}{\Delta \nu_s} \frac{2\pi(\nu_r - \nu_0)t - \sin 2\pi(\nu_r - \nu_0)t}{(\nu_r - \nu_0)^3} + \\ + 2R \left( v_{mk} - \sum_{n \neq l} \frac{v_{mn} v_{nk}}{W_n - W_k} \right) \frac{v_{kl} v_{lm}}{h^3 \Delta \nu_s} 2\pi \left\{ \frac{2\pi(\nu_r - \nu_0)t - \sin 2\pi(\nu_r - \nu_0)t}{(\nu_r - \nu_0)^2} + i \frac{1 - \cos 2\pi(\nu_r - \nu_0)t}{(\nu_r - \nu_0)^2} \right\} \quad (34)$$

ahol most a jobb oldali mennyiségek arra a beeső  $s$  fénykvantumra vonatkoznak, amelyre  $\nu_s = \nu_r$  és  $R$  az utána következő kifejezés valós részét jelenti.

E három kifejezés közül az első (22) diszperziós képlet végesnek maradó tagjaiból származik, a második az, amely a végtelen tag helyére lép\*, a harmadik pedig az első kettő közötti interferenciát adja és a diszperziós elektromos dipól-nyomaték négyzetreemelésével kapott keresztezett tagokat pótolja. Még világosabban lehet látni a második tag jelentését, ha a  $\nu_0$  rezonancia-frekvencia körüli  $\nu_0 - \alpha'$ -től  $\nu_0 + \alpha''$ -ig terjedő frekvenciasávba eső összes  $\nu_r$  frekvenciára összegezzük. (Ennek a sávnak a spektrumvonal elméleti szélességéhez viszonyítva nagynak kell lennie, hogy a közelítés érvényes legyen.) Ez a művelet egyenértékű a kifejezés  $(\Delta\nu_r)^{-1}$ -gyel való szorzásával és a frekvenciatartományra való integrálásával. Ha rövidség kedvéért a  $4\pi|v_{ml}v_{lk}|^2/h^4\Delta\nu_r\Delta\nu_s$  mennyiséget  $f(\nu_r)$ -rel jelöljük, elhanyagolva azokat a tagokat, amelyek  $t$ -vel nem korlátlanul nőnek vagy amelyek zérushoz tartanak, midőn az  $\alpha$ -k zérushoz tartanak, az eredmény lesz:

$$\begin{aligned} & \int_{\nu_0 - \alpha'}^{\nu_0 + \alpha''} f(\nu_r) \frac{2\pi(\nu_r - \nu_0)t - \sin 2\pi(\nu_r - \nu_0)t}{(\nu_r - \nu_0)^3} d\nu_r = \\ & = f(\nu_0) \int_{\nu_0 - \alpha'}^{\nu_0 + \alpha''} \frac{2\pi(\nu_r - \nu_0)t - \sin 2\pi(\nu_r - \nu_0)t}{(\nu_r - \nu_0)^3} d\nu_r + \\ & + f'(\nu_0) \int_{\nu_0 - \alpha'}^{\nu_0 + \alpha''} \frac{2\pi(\nu_r - \nu_0)t - \sin 2\pi(\nu_r - \nu_0)t}{(\nu_r - \nu_0)^2} d\nu_r = \\ & = f(\nu_0)(2\pi t)^2 \left[ \frac{1}{2} \pi - \frac{1}{2\pi t \alpha''} - \frac{1}{2\pi t \alpha'} \right] + f'(\nu_0) 2\pi t \log \alpha''/\alpha'. \end{aligned}$$

Így (34) második tagjának járuléka a  $\nu_0 - \alpha'$ -től a  $\nu_0 + \alpha''$ -ig terjedő keskeny frekvenciasávhoz két részből áll: egyike  $t^2$ -tel, a másika  $t$ -vel arányosan nő. A  $t^2$ -tel arányos rész:

$$\frac{1}{2} \pi f(\nu_0)(2\pi t)^2 = \frac{1}{2} (2\pi)^4 |v_{ml}v_{lk}|^2/h^4 \Delta\nu_r \Delta\nu_s \cdot t^2$$

éppen az, amely *Einstein* törvényeinek értelmében az atom magasabb állapotba és innen ismét az alacsonyabbba való tényleges átmeneteiből származik. Ugyanis annak valószínűsége, hogy az atom  $\tau$  idő alatt\*\* magasabb állapotba jusson:  $(2\pi)^2 |v_{lk}|^2/h^2 \Delta\nu_s \tau$  és ha a magasabb szintű állapotban van, annak az időegységre eső valószínűsége, hogy ismét alacsonyabbba ugorjon egy fénykvantum kibocsátásával a kívánt irány-

\* Meg kell jegyeznünk, hogy ez a második tag nem redukálódik a (22) összegezésben az  $l$  tag négyzetére, ha  $\nu_r$  nem a rezonáló frekvencia, hanem e mennyiség kétszeresére. Ez az eltérés onnan származik, hogy a sajátenergia-változással járó folyamatok a jelen cikkben alkalmazott kezdeti feltételek mellett nem teljesen elhanyagolhatók és egy olyan szórási folyamat, amelyet az 5. §-ban elhanyagoltunk, a rezonancia esetén egy sajátenergia változás nélküli folyamattá válik és a számításban benne van.

\*\* Ez az eredmény, valamint az emisszióra vonatkozó eredmény azonnal következik a *loc. cit.* (32) formulájából.



ban:  $(2\pi)^2 |v_{ml}|^2 / h^2 \Delta v_r$  úgy, hogy a teljes valószínűsége annak, hogy  $t$  időn belül mindkét átmenet bekövetkezzék:

$$\frac{(2\pi)^2 |v_{lk}|^2}{h^2 \Delta v_s} \cdot \frac{(2\pi)^2 |v_{ml}|^2}{h^2 \Delta v_r} \int_0^t \tau d\tau = \frac{(2\pi)^4 |v_{ml} v_{lk}|^2}{h^4 \Delta v_r \Delta v_s} \frac{1}{2} t^2.$$

Az idővel lineárisan növekvő rész hozzáadható az első és harmadik tag járulécaihoz, amelyek szintén ezen törvény szerint nőnek. Az atom periódusaihoz képest nagy  $t$  értékekre a  $t$ -vel arányos tagok elhanyagolhatók a  $t^2$ -tel arányosakhoz képest, és így a rezonáns szórt sugárzás teljesen az Einstein törvényeinek megfelelő abszorpciókból és az emissziókból származik.

Fordította:  
Bakács Istvánné és  
Csoma Zsigmond

# KÖNYVISMERTETÉS

**B. A. Robson (ed.): Nuclear Interactions  
Lecture Notes in Physics. 92  
Springer-Verlag, Berlin**

Az Ausztrál Tudományos Akadémia 1979. augusztusában nemzetközi konferenciát rendezett Canberrában Nukleáris kölcsönhatások címmel.

Az előadások a magfizika legjelentősebb fejezetei közül elsősorban azokat érintették, amelyek az utóbbi években gyors fejlődést mutattak. Így többek között a Nehéz-ion reakciók, a nagyspinű állapotok, az óriásrezonanciák, a hasadási rezonanciák és a kvark modellek problémakörének szenteltek különleges figyelmet.

Külön kell megemlíteni J. D. Walecka előadását, amely a magfizikában az utolsó tíz évben elért eredmények egyik legszebbikét ismertette „A maganyag állapotegyenlete és a véges magok tulajdonságai egy relativisztikus kvantum-térelmélet keretei között” címmel. Közismert az a régi probléma, hogy az erősen kölcsönható részecskék kvantitív leírását elsősorban az a körülmény akadályozza, hogy a kölcsönhatás erősségét jellemző csatolási állandó nagyon nagy, ezért a perturbáció számítás eszközei nem alkalmazhatók. Ennek a nehézségnek a megkerülése céljából Walecka a következő modellt vezette be. Tegyük fel, hogy a hadronikus anyagot három egymással erősen kölcsönható részecske alkotja. Ez a három részecske tér a barion tér ( $\Psi$ ), a semleges skalár mezon tér ( $\varphi$ ) és a semleges vektor mezon tér ( $V_\mu$ ).

Ezeket a részecskéket leíró termennyiségek a relativisztikus Klein—Gordon-, illetve Dirac-egyenletnek tesznek eleget:

$$\square \varphi - m_s^2 \varphi = -\frac{g_s}{c^2} \bar{\Psi} \Psi,$$

$$\frac{\partial F_{\mu\nu}}{\partial X_\nu} + m_v^2 V_\mu = ig_v \bar{\Psi} \gamma_\mu \Psi,$$

$$\left[ \gamma_\mu \left( \frac{\partial}{\partial X_\mu} - \frac{ig_v}{\hbar c} V_\mu \right) + \left( M - \frac{g_s}{\hbar c} \varphi \right) \right] \Psi = 0.$$

(Itt  $F_{\mu\nu} = \frac{\partial V_\mu}{\partial X_\nu} - \frac{\partial V_\nu}{\partial X_\mu}$ ;  $m_s$ ,  $m_v$ , és  $M$  a részecskék tömegét  $g_s$  és  $g_v$  a csatolási állandókat jelöli.)

A szokásos eljárás szerint először elhanyagoljuk a terek közötti csatolást és a szabad egyenletek, azaz a

$$\square \varphi - m_s^2 \varphi = 0,$$

$$\frac{\partial F_{\mu\nu}}{\partial X_\nu} + m_v^2 V_\mu = 0 \quad \text{és}$$

$$\left( \gamma_\mu \frac{\partial}{\partial X_\mu} + M \right) \Psi = 0$$

egyenletek megoldásaiból igyekezünk felépíteni a kölcsönható terekre érvényes megoldásokat. Ez azonban a perturbációs számítás eszközeivel nem valósítható meg. Walecka egy gyökeresen más eljárást javasol: Ne a kölcsönhatást „kapcsoljuk ki”, hanem első közelítésben inkább a mezon terek tér és időbeli változását hanyagoljuk el, azaz azt az idealizált esetet vizsgáljuk, amikor a barionok,



mint a mezon terek forrásai egy-egy homogén és statikus mezon teret hoznak létre. Ezek a terek klasszikus tereknek tekinthetők és a kvantált terek tér és időbeli átlagaként definiálhatók:

$$\varphi \rightarrow \langle \varphi \rangle \equiv \varphi_0,$$

$$V_\lambda \rightarrow \langle V_\lambda \rangle \equiv i\delta_{\lambda 4} V_0.$$

A téregyenletekből következik, hogy

$$\varphi_0 = \frac{g_s}{m_s^2 c^2} \langle \bar{\psi} \psi \rangle,$$

$$V_0 = \frac{g_v}{m_v^2} \langle \psi^+ \psi \rangle.$$

A bariontérre vonatkozó Dirac-egyenletbe ezen „átlagos mezon tereket” írva, az egyenletek most is ugyanúgy szétszétoldódnak, mint a hagyományos módszernél és exaktul megoldhatók. A lényeges különbség az, hogy most nem a szabad egyenletek megoldásaiból kiindulva kell felépíteni a kölcsönható terekre vonatkozó megoldásokat. Az „átlagos mezonterek” bevezetésével most a kiinduló egyenleteink a kölcsönhatás zömét már eleve tartalmazzák.

Ez a módszer igen hasznosnak látszik

a véges magok,

a végtelen maganyag,

a nagy sűrűségű maganyag és

a neutron csillagok

tanulmányozására, de legfőképp a maganyag-kvarkanyag közti fázisátmenet megértéséhez. (L. I.)

**H. Arenhövel—D. Drechsel: Nuclear Physics with Electromagnetic Interactions**  
**Lecture Notes in Physics. 108.**  
**Springer-Verlag, Berlin**

A kötet egy Mainzban tartott nemzetközi konferencia előadásainak az anyagát tartalmazza. A konferencia „A magfizika és az elektromágneses kölcsönhatások” címmel 1979. június 5. és 9. között került megrendezésre. Fő témái a következők voltak:

1. Elektronok rugalmas és rugalmatlan szórása magokon. (Ezen a módon a protonok és neutronok sűrűségeloszlását, illetve a mágnesszettség magbéli eloszlását lehet meghatározni.)
2. Elektromágneses sugárással kiváltott magreakciók.
3. Óriás rezonanciák gerjesztése.
4. Gerjesztett nukleonok (pl. rezonanciák) keltése magon belül.
5. Nagyenergiájú elektronok, illetve elektromágneses sugárzás előállítására alkalmas gyorsítók. (Linerális gyorsítók, ciklotronok, mikrotatronok, szupravezető ciklotronok.)

Az igen kitűnő szerzők előadásai közül itt csak P. Axel előadását emeljük ki, amely egy viszonylag új kísérleti módszer alkalmazásáról szól. Ennek a „Nuclear studies with tagged photons” című előadásban ismertetett, új módszernek a lényege a következő: Nagy energiára gyorsított elektront ütköztetünk egy nehéz atomokat tartalmazó céltárgyba úgy, hogy az elektron nagy energiájú fékezési sugárzást hozhasson létre. A fékezési sugárzást azután a vizsgálni kívánt reakció létrehozására használjuk. Minthogy a fékezési sugárzás spektruma folytonos, azért nem tudjuk megmondani, hogy a kiváltott reakcióért milyen energiájú foton volt a felelős. Ha azonban a reakció termékeket koincidenenciában figyeljük meg a fékezési sugárzás kibocsátása során eltérült elektronnal, akkor az eltérülés szögéből és az elektron energiájából vissza lehet következtetni a fékezési sugárzás energiájára. Így tehát egy olyan foton nyalábot nyerünk, amelyben az egyes fotonok különböző energiának ugyan, de mindegyikről tudjuk, hogy mekkora az energiája. Ezzel a módszerrel tehát a foton energiájának függvényében lehet vizsgálni a reakciókat, a több száz MeV-es tartományban is úgy, mintha monokromatikus „fényforrás” állna rendelkezésünkre. (L. I.)



**A. F. Ranada (ed.): Nonlinear Problems in Theoretical Physics  
 Proceedings, Jaca, Huesca (Spain) 1978  
 Lecture Notes in Physics 98  
 Springer-Verlag, Berlin**

Ez a kötet a IX. GIFT (Grupo Interuniversitario de Física Teórica) Elméleti Fizikai Nemzetközi Szeminárium előadásait tartalmazza. Ezt a szemináriumot a spanyolországi Jacán, Huescában tartották 1978 júniusában „Az elméleti fizika nemlineáris problémái” témakörből.

Az iskola témája modern és fontos. Az előadások felölelik a fizika legkülönbözőbb olyan területeit, amelyekben a nemlineáris jelenségek fontosak.

Az első előadást A. O. Barut tartotta a klasszikus elektrodinamikában előforduló nemlineáris problémákról. Az előadás célja megadni egy olyan egyenletet, amely leírja a sugárzó és önmagával kölcsönható elektront mint egészet, azaz a „felöltözött” elektronra vonatkozó egyenletet. A szerző az elvet először a klasszikus relativisztikus pont elektron elméletben mutatja be. Ezt aztán kiterjeszti a kvantumelméletre. Sok kérdést csak érint az irodalomra utalva az érdeklődő olvasót.

I. Bialynicki—Birula előadásában a szolitonok stabilitásáról ír. Felsorolja a lehetséges stabilitási kritériumokat: Ljapunov, Poincaré és perfekt stabilitás. Ezután nemrelativisztikus és relativisztikus modelleken vizsgálja ezek teljesülését, a logaritmikus Schrödinger-egyenlet, relativisztikus önkölcsönható skalártér és mértékterek a legfontosabb példák.

A következő három előadást, F. Calogero, A. Degasperis és D. Levi írta, de a szemináriumon D. Levi mondta el. Mindhárom előadás az inverz szórás módszerrel, a szerzők által spektrális transzformációnak nevezett módszerrel foglalkozik. F. Calogero előadása bemutatja a módszert, párhuzamot vonva a spektrális transzformációk módszere és a Fourier-transzformáció módszere között. A. Degasperis előadásában részletesen tárgyalja a spektráltranszformációk módszerét, kihasználva az (általánosított) Sturm—Liouville-probléma megoldására vonatkozó Wronsky-féle relációk általánosítását. Az előadás részletes és alkalmas a módszer megértésére és megtanulására. D. Levi előadása a spektráltranszformációk módszerét nemlineáris diszkrét evolúciós egyenletek megoldására használja fel. A módszer segítségével nemlineáris differenciálegyenleteket vizsgál, ezek az egyenletek igen fontosak a hálózatok, a statisztikus fizika, a sorbanállás és az ekológia nemlineáris kérdéseinek tanulmányozásában.

C. M. Dafermos előadása a kontinuumfizika hiperbolikus egyensúlyi törvényeit tárgyalja. Az első öt fejezetben áttekinti a modern kontinuumfizikai elméletek szerkezetét. Az alapvető gondolatokat a hiperelaszticitás elméletén mint példán mutatja be. Az utolsó részben a nemlineáris hiperbolikus rendszerek elméletében a sima megoldások hiányának kérdését (hullámszakadás, szakadási felületek kialakulása) és a gyenge megoldások egyértelműségének hiányát tárgyalja, és megmutatja, hogyan használhatók fel a kontinuumfizikából lezármaztatható gondolatok egyetlen fizikailag megengedett megoldás kiválasztására.

W. Strauss előadásában a klasszikus nemlineáris téregyenletekkel kapcsolatos matematikai kérdésekkel foglalkozik. Tárgyalja a nemlineáris Schrödinger-egyenletet, alkalmazását a lézerek elméletében és kötött állapotait. Vizsgálja a megoldások létezésének kérdését és a szóráselméletet a nemlineáris Klein—Gordon-egyenlet esetében. Az invarianciákból következő megmaradási törvényeket is tanulmányozza és alkalmazza az eredményeket többek között a Yang—Mills-egyenletekre is. Az előadás áttekintő jellegű, a részleteket nem tárgyalja minden esetben.

J. Gutierrez, A. Munier, J. R. Burgan, M. R. Feix és E. Fijalkow dolgozata a nemlineáris transzport egyenletek olyan tulajdonságaival foglalkozik, amelyek a transzformációs csoportokból vezethetők le. Ez a módszer lehetővé teszi adott kezdeti konfigurációk időfejlődésének leírását és egy adott matematikai modell lehetséges skálátörvényeinek levezetését. Az utóbbiak a fúziós berendezések elméletében lehetnek jelentősek.

C. Montes egy, a plazmafizikában fellépő nemlineáris kinetikus egyenlet szoliton megoldásait tárgyalja. Rámutat, hogy a fotonok indukált Compton-szórása, és a plamonok nemlineáris Landau-féle fékeződése a plazmarészecskében ugyanarra a nemlineáris integro-differenciálegyenletre vezet. Numerikus módszerekkel szolitonszerű viselkedést kap ezen egyenlet széles kezdeti feltétel osztályaihoz tartozó megoldásaiban.

A könyv nagyon hasznos a fizika különböző területein dolgozó és a nemlineáris problémákkal foglalkozó fizikusok számára. Az előadások jó része alkalmas arra, hogy azokból az olvasó betekintést szerezzen az adott témakörbe. Megtanulhatjuk e könyvből, hogy a fizika legtöbb területén a döntő fejlődés leginkább a nemlineáris problémák megoldásainak mind alaposabb megismerésétől várható.

Horváth Zsolt



**T. Tamir (ed.): Integrated Optics  
Topics in Applied Physics, 7. kötet  
Springer-Verlag, 1979**

Második kiadását érte meg az első ízben 1975-ben megjelent könyv. A jelen, 333 oldalas kiadás lényegében azonos az előző kiadással, kivéve a tizenöt oldalas 7. fejezetet, mely az integrált optika terén az elmúlt esztendőben elért eredményeket foglalja össze, és 284 újabb hivatkozást ad.

Az első fejezetben T. Tamir az integrált optika mintegy két évtizedes történetét tekinti át. A második fejezetben H. Kogelnik a dielektromos hullámvezetők elméletét tárgyalja. A lézersugár átalakítása felületi hullámmá és viszont számos kísérleti és elméleti problémát vetett fel. Az ezekkel kapcsolatos vizsgálatokkal foglalkozik a T. Tamir által írt harmadik fejezet. Ugyancsak ez a fejezet ismerteti az ún. hullámvezető kapcsolókat is. A dielektromos hullámvezetőkben történő fény moduláció a tárgya a negyedik fejezetnek. J. M. Hammer részletesen tárgyalja az elektrooptikai, akusztó-optikai és a magnetooptikai effektuson alapuló modulátorokat. A passzív komponensek (hullámvezetők és kapcsolók) előállításával és minőségellenőrzésével az 5. fejezetben F. Zernike foglalkozik. A monolitikus integrált optikában az összes optikai funkciót egy anyagon belül kell kialakítani. E. Garmire, a hatodik fejezet írója szerint ebből a szempontból a GaAs kristálynak kitüntetett szerepe van, ezért főleg ezzel a kristállyal foglalkozik.

A könyv mindazoknak ajánlható, akik egy jó áttekintő képet kívánnak kapni az integrált optika széles területéről. *H. E.*

**A. Weber (ed.): Raman Spectroscopy of Gases and Liquids  
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1979**

Ez a mű részletes összefoglalást ad a gázfázisú anyagokon történő Raman-szórás területén elért eredményekről, és némi betekintést nyújt a folyadékok Raman-szórásába is.

A molekulák vibrációs és rotációs spektrumának vizsgálatára alkalmas Raman-spektroszkópia eredményeit napjainkban már az alapkutatókkal foglalkozóknak kívül a kémia és fizika számos területén dolgozó fizikusok és mérnökök használják. Ehhez nyújt igen hasznos segítséget ez a mű, melynek egyes fejezeit az adott szakterület kiváló művelői írták.

Rövid történeti áttekintést nyújtó bevezető fejezet után a 2. és 3. fejezet a gázok nagyfelbontású rotációs-vibrációs és tiszta rotációs spektroszkópiáját ismerteti. Gázok és folyadékok Raman-szórás hatáskeresztmetszetének elméleti és kísérleti adatait találjuk meg a 4. fejezetben, míg az 5. fejezet a Raman-vonalak kiszélesedését tárgyalja. Az utóbbi időben egyre nagyobb érdeklődést kiváltó rezonancia Raman-szórás, valamint a koherens anti-Stokes Raman-szórás (CARS) az 5. és 6. fejezet témája.

A gazdag irodalomjegyzék napra készen vezeti be az olvasót a legújabb eredményekbe.

*Richter Péter*

**Jean Cea: Lectures on Optimization — Theory and Algorithms  
TATA Institute of Fundamental Research, Bombay  
Springer-Verlag, 1979**

Nemlineáris programozási feladatok (nemlineáris függvény minimalizálása, ill. maximalizálása, nemlineáris függvények által meghatározott feltételhalmazon, vagy az optimalizálandó függvény teljes értelmezési tartományán) megoldási módszereiről ad áttekintést a könyv, egyetemi előadássorozat formájában.

Az optimalizálási módszerek tárgyalását az első két fejezet alapozza meg: „Differenciálszámítás normált lineáris terekben”, ill. „Funkcionálok minimalizálhatóságának elmélete” címmel. A harmadik és negyedik fejezet igen részletesen ismerteti a legfontosabb feltétel nélküli, ill. feltételes minimalizálási algoritmusokat, pl. a csökkenő irányok módszerét, az általánosított Newton-módszert, a konjugált gradiens módszerét, a gradiens projekciót, a Gauss—Seidel-módszert, a relaxáció elvét. Külön fejezet foglalkozik a dualitás elméletén alapuló Lagrange-szorozók módszerével, Uzawa módszerével, ill. nemdifferenciálható függvények minimalizálásával. Végül a hatodik fejezetben optimális irányítási és tervezési problémák tárgyalására is sor kerül. A jegyzethez igen bőséges, a problémákör művelőinek legkiválóbbjait felsorakoztató irodalomjegyzék tartozik.

A könyvet azoknak ajánljuk, akik a matematikai programozás elmélete iránt érdeklődnek, és jártasak az analízis-algebra tudományában, ugyanis az említett módszerek Banach- és Hilbert-terekben, Gateaux, ill. Frechet-deriválhatósággal stb. kerülnek ismertetésre. (Sz. T. P.)



**B. K. Agarwal: X-Ray Spectroscopy**  
**Springer Series in Optical Sciences**  
**Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1979. pp. 418**

A monográfia alapját egy egyéves egyetemi előadássorozat képezi, de kitűnő bevezetés bárki számára, aki ezzel a területtel meg kíván ismerkedni, sőt a röntgen-spektroszkópiában dolgozó kutatók is haszonnal forgathatják, mint kézikönyvet. Ez utóbbi célt különösen elősegítik a könyv végén található függelékek (összesen tíz, pl. az elektronbetöltődési táblázat a szabad atomok nivóin; a Pauling-féle elektronegativitási skála; a Rutherford-szórás, az árnyékolási effektus tárgyalása stb.) és hullámhossz táblázatok hasznos referencia vonalak paramétereivel, és a  $K$  és  $L$  abszorpciós élekkel. A könyvet részletes irodalmi jegyzék, valamint név- és tárgymutató zárja.

A könyv nyolc fejezetének tárgyszerinti megoszlása a következő: Az első kettőben a folytonos és karakterisztikus röntgensugárzás keletkezésének, fő jellegzetességeinek tárgyalását és elméleti értelmezését találjuk. Az ezután következő fejezet a röntgensugárzás abszorpciójával, reflexiójával és szórásával (koherens és inkoherens szórás) és általában az anyaggal való kölcsönhatásával foglalkozik. Ennek keretében esik szó az Auger-elektronokról, a szatellit-vonalakról és í. t. A röntgen-vonalak eltolódása és finom szerkezete, valamint az abszorpciós élek finom szerkezete (EXAFS) valószínűleg az ezeken a jelenségeken alapuló fontos alkalmazások miatt került külön fejezetbe. Ez indokolja a lágy röntgenspektroszkópia SXS, (20—500 Å) külön fejezetben szerepeltetését is. Az utolsó fejezet végül a kísérleti berendezéseket és módszereket foglalja össze.

A könyvben végig igen elmélyült elméleti tárgyalást találunk az egyes jelenségekre vonatkozólag. Ehhez képest a kísérleti rész viszonylag szegényesebb. Alig indokolható pl., hogy az olyan nagy jelentőségű felvezető röntgen-detektorokra összesen egy rövid bekezdés jut, de itt se történik egyáltalán említés se a Ge(Li), még kevésbé a tiszta Ge detektorokról. Sajnálatos az is, hogy még utalás sincs az elektron és fotogerjesztésen kívül a proton és nehéz ion bombázással kiváltott röntgensugárzás jelenségeiről. Végül hasznos lenne legalább egy rövid ismertetés az alkalmazások szempontjából olyan nagy jelentőségre szert tett röntgen-fluoreszcencia analitikai módszerre.

*Berényi Dénes*

**I. I. Sobelman: Atomic Spectra and Radiative Transitions**  
**Springer Series in Chemical Physics, 1 vol., 1979**

A szerző már kb. 15 évvel ezelőtt megjelent orosz nyelvű művében is feltűnt, hogy az atomi spektroszkópiával kapcsolatos szokványos problémák mellett nagy figyelmet szentelt az elektromágneses tér és kötött elektronrendszerek kölcsönhatásai és a spektrumvonalak kiszélesedésével kapcsolatos jelenségek elméleti háttere magyarázatának. Jelen kötet az említett mű kiterjedt revíziója mellett különösen az atomok gerjesztésével foglalkozó fejezetet bővítette jelentős mértékben.

A szóban forgó mű tulajdonképpen két kötetre tervezett munka első kötete, és lényegében az említett forrásmunka 1—6, 8 és 9 fejezetének javított és kibővített kiadása. Elhagyta a Dirac-egyenlettel, a Hartree—Fock-módszerrel és a relativisztikus korrekciókkal foglalkozó részeket és sokkal inkább koncentrált átmeneti valószínűségekre és a sugárzó átmenetek effektív hatáskeresztmetszeteire mind a diszkrét, mind pedig a folytonos spektrumtartományban.

A 306 oldal terjedelmű mű 9 fejezetre oszlik. A kezdő fejezetek a hidrogénatom és több-elektromos atomok termrendszerét tárgyalják. Külön fejezet foglalkozik az impulzusmomentum- és tenzoroperátorokkal, a különböző csatolásokkal, a spektrumvonalak hiperfinom szerkezetével és külső elektromos és mágneses erőterben fellépő felhasadásokkal. Nagy teret szentel az elektromágneses sugárzási tér és az elektronok kölcsönhatásának, fotorekombinációs és fotoionizációs folyamatoknak.

A könyv rendszeresen és igen áttekintően tárgyalja az atomi spektrumok elméletét. Jó téma-választással elsősorban a kísérleti szempontból fontos jelenségek elméleti alapjainak magyarázatára törekszik. A könyv egy kitűnő kiegészítője a Coulson és Shortley, Racah, Fano, Griffith, Wybourne és Judd neveivel fémjelzett hasonló témakörű műveknek. (R. K.)



**Landolt—Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology  
New Series, Group II., Volume 9, Part C2:  
Magnetic properties of free radicals**

Az 1965-ben kiadott II/1 jelzésű eredeti mű II/9 pótkötetét technikai okokból több részre osztották. Jelen mű az O, P, S, Sc, Si, Ge, Sn, Pb, As és Sb központi atomokat tartalmazó gyökök mágneses adatait, főleg  $g$  faktorait és hiperfinom csatolási konstansait tartalmazza. Gázfázisban levő poliatomos gyökök esetében azonban természetesen egyéb hiperfinom csatolási állandókat is megad. Az állandók meghatározásánál alkalmazott, ill. a gyökök előállításával kapcsolatos kísérleti módszereket is közli. Ritkábban foglalkozik a gyökök mágneses momentumaival. Az adatgyűjtés az 1964—75 időtartamot öleli fel.

A 320 oldal terjedelmű kötet kb. 2500 gyök adatait tartalmazza. A már említett oxigén és heteroatomokat tartalmazó gyököket 5 osztályba sorolja, mégpedig oxi-és peroxialkil, aroxil, foszforközéppontú, kén és szelén középpontú és egyéb középpontú gyökök osztályaiba. Egy osztályon belül további felosztás érvényesül, pl. a foszforcentrált gyökökön belül kapnak helyet a foszfinil, foszfonil, foszforanil és foszfónium gyökök. Minden osztály külön bevezetővel rendelkezik, amely megkönnyíti a konkrét vegyület fellelését. Az általános anyagindex az 1980 elején megjelenő II/9 d 2 kötetben fog helyet kapni.

A könyv a szerves és fémorganikus kémia szinte valamennyi területén általános érdeklődésre arthat számot. (R. K.)

**M. B. Salamon (ed.): Physics of Superionic Conductors  
Topics in Current Physics, 15 kötet  
Springer, 1979**

Jelen monográfia egy viszonylag új, rendkívül érdekes és nagy gyakorlati jelentőségű kutatási terület legújabb eredményeit foglalja össze. A  $10^{-1} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$  fajlagos vezetőképességű szuperionvezető kristályokban egyes ionok a rácspontokban foglalnak helyet, míg mások igen kis aktivációs energiával (0,1 eV) viszonylag könnyen átmuthatnak más rácspozíciókba. Ezzel kapcsolatban számos elméleti probléma merül fel, melyek megoldása a könyv fő célkitűzése.

A 256 oldal terjedelmű mű 8 fejezetre tagolódik. Az egyes fejezetek cikkszerű formában foglalkoznak témáikkal. A bevezető fejezetben M. B. Salamon exponálja a monográfia célkitűzéseit. A második fejezetben J. B. Boyce és T. M. Hayes kiterjesztett röntgenabszorpciós finomszerkezet meghatározási módszerrel kapott eredményeit közli. Ezek alapján a mozgékony ionok egyenlő valószínűséggel töltik ki a rácsonrádiuszokon kívül fekvő térrészeket. A harmadik fejezetben C. M. Shapiro és F. Reidinger neutronszórás kísérletei alapján szintén arra a következtetésre jut, hogy a mozgékony ionok előnyben részesítik a nyeregpont pozíciókat. A 4. fejezetben H. V. Beyeler et al. frekvenciafüggő vezetőképességi mérések alapján korrekciós tagokat számol a szokásos Flynn-féle többrészcskés átugrási modellhez. Ez egyúttal magyarázza az infravörös fotovezetési csúcst is. Az 5. fejezetben M. V. Delaney és S. Ushioda összegzi az idevonatkozó optikai adatokat. Az éles Raman-vonalak hiánya erős fonon—fonon csatolásra utal a mozgékony és a rácspontokban lokalizált részecskék módusai között. P. M. Richards a 6. fejezetben főként NMR relaxációs kísérleti adatok elméleti elemzése alapján különböző relaxációs időket számol a részecskék korrelációs függvényeiből. Paramágneses szennyező ionok ESR adatait is elemzi. A 7. fejezetben M. B. Salamon a koherens mozgékony ion effektusokat tárgyalja a fázisátmenetek elmélete alapján, továbbá a rövidtávú rendparaméter és ionvezetés között állapít meg összefüggést. A 8. fejezetben T. Geisel az egyszerű átugrási elmélet helyett folytonos diffúziós modellt javasol, melyben a fix ráccsal való kölcsönhatás sűrűládként szerepel. Az elmélet jól magyarázza az optikai és rugalmatlan neutronszórási kísérleti adatokat.

Van Gool könyve (1973), továbbá Makan (1976), Geller (1977) és Hagemüller (1977) monográfiái után jelen monográfia több esetben még nem publikált új eredményekről tudósít és elsősorban a területen érdekeltek, nem pedig az érdeklődők számára készült. Az egyes cikkek mind kísérlet-technikai, mind pedig elméleti szempontból igen magas színvonalúak, nagyszerűen példázzák, hogy különböző módszerek és technikák magasszintű alkalmazása esetén egy új kutatási területen is viszonylag rövid idő alatt lehetséges az egységes tudományos kép kialakítása. (R. K.)



**Jerzy Kijowski, Włodzimierz M. Tulczyjew: A Symplectic Framework for Field Theories**  
**Lecture Notes in Physics, 107**  
**Springer-Verlag, 1979**

A könyv a klasszikus térelméletek új elvi keretét fogalmazza meg. Célja az, hogy az elméleti fizikusoknak új fizikai gondolatokat mutasson be. Nagyobb hangsúlyt kap a munkában a fizikai intuíciónak, mint a matematikai szigor.

Ez az új matematikai keret egyesíti a térelméletek variációs és kanonikus megfogalmazását, mint ugyanazon szimplektikus struktúra különböző megjelenési formáját. Szisztematikus eljárást ad fizikai elméletek variációs megfogalmazásának bevezetésére. Bár a könyv címe klasszikus térelméletekre utal, a matematikai keret alkalmas a pontmechanika leírására is.

Az I. fejezet a sztatika szimplektikus analízisét adja. Diszkrét és folytonos rendszereket is vizsgál intuitív módon. Az elmélet reciprocitásának és potenciálosságának fogalmát tárgyalja.

A II. fejezet a részecske dinamikájával foglalkozik és a geometriai szerkezet jóval szigorúbb leírását adja. A 6. részben definiálja a Lagrange-féle részsokaságokat és generáló függvényeiket. A 7. részben a részecske állapotok véges időtartam alatt lezajló időbeli fejlődését tárgyalja. A 8. rész a dinamika Lagrange-féle leírását adja. A 9. részben a Hamilton-féle tárgyalást vezeti le. A 11. részben a Cartan-féle forma segítségével fogalmazza meg a dinamikát.

A III. fejezet a kötet legfontosabb része. A 13. részben megkonstruálja a tér kanonikus impulzusát. A terek dinamikáját először a téridő véges tartományában tárgyalja. Ezt először a 14., 15. részben írja le heurisztikus szinten. A 16. résztől kezdve matematikai pontossággal mutatja be az infinitezimális dinamikát. A 19. részben definiálja az energiáimpulzus sűrűséget, mint kontroll módusok családjához kapcsolódó potenciálját a dinamikának. A 19. rész a legbonyolultabb része ennek a kötetnek. Először bemutatja az eredményeket bizonyítás nélkül koordináta leírásban. Majd feltárja az állítások tartalmát és végül bebizonyítja azokat. A 20. részben a dinamikát Cartan-féle formák segítségével fogalmazza meg. A 22. és 23. részben bevezetik a dinamika időfejlődésének megfogalmazását. A 24. részben a Hamilton—Jacobi-tétel infinitezimális alakját bizonyítják.

A IV. fejezet példákon mutatja be az új közelítés különböző vonásait. A legegyszerűbb példa a 26. részben tárgyalt tenzor tér. A kényszerek használatára példa a 27. részben tárgyalt Proca-tér. A 28. részben mértékterekre mutat példát. A 29. részben a gravitáció elméletének új, általánosabb megfogalmazását adja.

Az utolsó fejezet a hidrodinamika variációs megfogalmazását mutatja be.

A függelékekben a gyakran használt geometriai fogalmak rövid áttekintését adja.

A kötet rendkívül érdekes új megvilágításban mutatja be a klasszikus térelméleteket. Közelebb hozza az elméleti fizikát és a modern differenciálgeometria eredményeit. Rendkívül hasznos az adott területen dolgozó matematikai fizikával foglalkozó kutatók számára. Színvonalas és egyéni megfogalmazású mű, gyors megjelenése a kiadó rugalmasságát dicséri.

*Horváth Zsolt*

**M. D. Scadron: Advanced Quantum Theory and Its Applications Through Feynman Diagrams**  
**Texts and monographs in physics**  
**Springer-Verlag, 1979**

Valamelyik Elméleti Fizikai Nyári Iskolán az egyik kiváló előadó így kezdte az előadását: a fölösleges bonyodalmak elkerülése végett a továbbiakban legyen  $n=c=2\pi=1$ . Könyvének bevezetésében Scadron azt vallja, hogy a mélyebb összefüggések tanulmányozásával a csata csak félig van megnyerve, s véleményének alátámasztására egy híres fizikust idéz, aki szerint „ha nem kapod meg a helyes  $2\pi$ -faktorokat, nem értesz semmit.”

Ebből az álláspontból kiindulva vállalkozik a szerző arra, hogy az egyrészecske-kvantumelmélet minimális kiterjesztése alapján megismertesse az olvasóval a Feynman-diagramok technikáját és ennek alkalmazását az alapvető kölcsönhatási folyamatok perturbációs számítására. A könyv I. része áttekinti a nemrelativisztikus kvantummechanika fogalmait, megadja a relativisztikus hullámegyenleteket és csoportelméleti módszerekkel tárgyalja a Lorentz-invariancia és az alapvető diszkrét szimmetriák (C, C, P, T) kvantumelméleti leírását. A II. rész a nemrelativisztikus S-mátrixelmélettel foglalkozik, alkalmazásként egyszerű problémákat véve az atomfizika, a magfizika és a szilárdtestfizika területéről. A Feynman-diagramokkal operáló relativisztikus szórásszámításnak egyszerű kvantummechanikai megfontolásokra épülő megfogalmazása a III. rész tárgya. A szerző célkitűzésének megfelelően ez a rész adja a könyv központi témáját; itt találhatjuk meg az alapvető elektromágneses, erős, gyenge és gravitációs folyamatok perturbációs számítását legalacsonyabb



rendben, valamint a magasabb rendű korrekciók és a renormálás problémájának tárgyalását. Az utolsó fejezet a diszperziós összefüggések elméletének rövid áttekintésével zárul.

Bár nem teljesen egyértelmű, hogy a vizsgált problémák térelméleti alapon való tárgyalása akár fogalmilag, akár technikailag ténylegesen bonyolultabb lenne, Scadron könyve mindenképpen hasznos munka. A modern kvantumelmélet tanulmányozásában elmélyedni kívánó fizikus hallgatók számára jó előkészítő a térelmélet elvi és gyakorlati problémáinak áttekintéséhez, s a terület szakemberei is felhasználhatják munkájukban a fő alkalmazásokat. Kompaktul összefoglaló fejezeteket. A nálunk jelenleg fennálló oktatási rendszerben a könyv anyaga jól beleillik egy speciális előadás kereteibe. E nem elhanyagolható szempontok mellett, úgy tűnik, legnagyobb haszonnal azok forgathatják a könyvet, akik a kvantumtérelmélet részleteibe nem szeretnének belemerülni, ugyanakkor munkájukban nélkülözhetetlen az alapvető fizikai folyamatok legegyszerűbb kvantumelméleti értelmezésének ismerete. Igen értékes része a munkának az egyes fejezetekhez csatlakozó számos gyakorlati érdekességű feladat és a jól összeállított irodalomjegyzék. (N. T.)

**A. J. Chorin, J. E. Marsden: A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics  
Springer-Verlag, New York—Neidelberg—Berlin, 1979**

A könyv szerzői a következőképpen határozzák meg az előszóban a könyv célját: „Matematikailag vonzó módon (és ez nem jelent „teljes szigorúságot”) prezentálni a folyadékmechanika néhány alapelvét, megmutatni a fizikai hátterét és a motivációját azoknak a módszereknek, amelyeket a Navier—Stokes-egyenletek és a hiperbolikus differenciálegyenletek megoldásában alkalmaznak, és végül felkelteni az egyetemi hallgatók érdeklődését a nehéz, de szép téma iránt”.

A szerzők céljukat derekasan és elegáns könnyedséggel teljesítették (sőt túlteljesítették). A tartalomjegyzék szokatlanul tömör; összesen három fejezetcím és tíz alfejezetcím:

*A mozgásegyenletek; az Euler-egyenletek, rotáció és örvény; Navier—Stokes-egyenletek. Potenciális áramlás és lamináris viszkózus áramlás; potenciális áramlás, határrétegek, örvényrétegek. Egydimenziós gázáramlás; karakterisztikák, lökéshullámok, a Riemann-féle probléma, égéshullámok.*

A könyv tartalma tehát „válogatott fejezetek” a hidrodinamikából. A szerzők jó érzékkel választották ki a hidrodinamikának azokat a fejezeit, amelyeknek a segítségével szignifikánsan illusztrálhatták a hidrodinamikában használatos matematikai módszereket, és minden bizonnyal sok egyetemi hallgató érdeklődését sikerült felkelteniük a nehéz, de szép téma iránt.

Az egyetemi oktatók figyelmét külön is érdemes felhívni a szerzők tárgyalásmódjának egyszerű és világos stílusára, az előadásmód tömörségére, a matematikai „tisztaságra”. „A határrétegek” és „az örvényrétegek” című alfejezetben olyan problémákat is ismertetnek a szerzők, amelyek más hidrodinamikai szak- és tankönyvekben általában nem találhatók. Külön figyelmet érdemel, hogy a szerzők e fejezetekben nagy gondot fordítanak annak hangsúlyozására, milyen összefüggések következnek az alapegyenletekből és melyek a kísérleti eredményekre alapozott fél-empirikus formulák.

Haszonnal forgathatják a könyvet a hidrodinamika iránt érdeklődő egyetemi hallgatók, de nem kevesebb hasznára lehet az áramlástant oktató, ill. e témakörben kutató munkát végző fizikusoknak és mérnököknek is.

Szabó János

**Fazekas Patrik: Antiferromágnesség és szimmetria sértés  
Watterich Andrea: Ponthibák adalékolt alkálifluoridokban  
A szilárdtestkutatás újabb eredményei 4. kötet**

A legszimmetrikusabb fázis a gázállapot. Az alacsonyabb szimmetriájú állapotba való átmenet fázisátalakulás formájában jelentkezik. Fazekas Patrik abból az elvből indul ki, hogy a kondenzált rendszerek fizikája az anyagnak a szimmetriasértések során kialakuló állapotait, a szimmetriasértés következményeit vizsgálja. Tanulmányának célja, hogy egy konkrét példán: az antiferromágneses fázis kialakulásán mutassa be a szimmetriasértés folyamatát. Elsőnek a mágneses rendeződés alap-típusait a következőképpen csoportosítja. A Heisenberg—Hamilton-operátorban szereplő  $J$  együtt-ható előjelétől függően (a spinek párhuzamos beállításának kedvező)  $J < 0$  esetben az alapállapot ferromágneses vagy (amikor a legközelebbi szomszédok közötti kölcsönhatás előjele pozitív)  $J > 0$  esetben Néel szerint olyan antiferromágneses alapállapottal állunk szemben, amelyben a legközelebbi szomszédok spinjei ellentétes irányban állnak. A Néel-állapot és a nem ilyen típusú antiferromágneses állapot, ill. annak a kérdésnek vizsgálata, hogy mennyiben tekinthető univerzálisnak a klasszikus



Néel-féle viselkedés az antiferromágneses Heisenberg-operátorral leírható rendszerek körében, adja a tanulmány egyik fő célját. A tárgyalás központja a szimmetriasértés kialakulásának mechanizmusa. Miután ismerteti az antiferromágnesség elméletének kialakulását, diszkutálja azt a kérdést, hogy az  $S=1/2$  háromszögács antiferromágneses alapállapota Néel-állapot vagy szingulett spin-folyadék-e.

A szingulett alapállapot fellépése és a rácsszerkezet közötti kapcsolat kérdése vezeti be a spontán szimmetriasértés mechanizmusának a termodinamikai határesetben való taglalását. A tanulmányt az anizotróp háromszögács-antiferromágneses vizsgálata zárja be.

Fazekas Patrik stílusa élvezetes, mondanivalójában lényegre tör, gondolatvezetése könnyed. Munkája teljesen megfelel a szilárdtestfizika sorozat célkitűzésének.

A kötet másik tanulmánya Watterich Andrea: Ponthibák adalékolt alkálihalogenideken.

A témát annak idején Pohlék a szelén tulajdonságainak megértése érdekében kezdték el. Az alkálihalogenidek azóta is sokszor játszották el a „minta”, a kísérleti póttanyag szerepét. Így pl. amikor nemzetközi együttműködésben megkezdődött az Antarktisz kutatása, a hirtelen hőváltozások hatásait Kear és Pratt először alkálihalogenideken vizsgálta meg. A Pohl-korszak (ebben vett részt kezdetől fogva Gyulai Zoltán akadémikus) óta az alkálihalogenidek számos közvetlen alkalmazást nyertek, amelyek nagyrészt a bennük levő szennyezésekkel kapcsolatos ponthibák tulajdonságain alapulnak. Ezen alkalmazásokat Watterich röviden be is mutatja.

Watterich maga is a ponthibák kutatója, egyik tudományos eredménye a Z-centrumokkal kapcsolatos, kísérleti fizikus a hazai Gyulai—Tarján-iskola értelmében. Jelen munkája átfogó képet nyújt a kristályok vizsgálati módszereiről, a színcentrumok előállítási módjairól, a bennük az előállítás folyamán termodinamikai okokból mindenképpen kialakuló, ill. az adalékanyagok beépülésekor keletkező ponthibákról.

Véleményem szerint mind Fazekas Patrik, mind Watterich Andrea munkája idegen nyelven is megjelentetve könyvsikerre számíthatna. (T. Gy.)

#### Gergely György (szerk.): Szilárdtestfelület-vizsgálatok új módszerei I.

A Szilárdtestkutatás Újabb Eredményei 5.  
Akadémiai Kiadó, Budapest, 1979

A modern felületvizsgálati módszerek az utóbbi évtizedben robbanásszerűen fejlődtek, alkalmazásaik rendkívüli gyakorlati jelentőségre tettek szert. Ezért különösen időszerű e módszerek áttekintő jellegű bemutatása a fenti sorozatban.

A 228 oldalas kötet négy tanulmányt tartalmaz, amelyek összehasonlító elemzései a felületvizsgálat problémáiba való bevezetésül szolgálnak, illetve a legfontosabb vizsgálati módszerekről (XPS, UPS, SIMS) tájékoztatást adnak.

Berényi Dénes tanulmánya a modern felületvizsgáló módszerek sokoldalú, rendszerező áttekintése. A különböző szempontok (elemi analízis, mélységi analízis, monoréteg-, felületi eloszlás-, izotóppösszetétel-, kémiai szerkezet-, felületi geometriai elrendeződés-vizsgálatok) szerint összeállított táblázatok jól áttekinthetően hasonlítják össze a felületvizsgáló módszerek legfontosabb jellemzőit. A tanulmány tartalmazza az egyes módszerek rövidített jelölését, a megfelelő angol és magyar elnevezéseket, valamint néhány szélesebb körben használatos módszer rövid ismertetését.

A szilárd testek szabad felületével kapcsolatos alapfogalmakat tisztázza Bodó Zsolt és Gergely György tanulmányának első fejezete. A makroszkopikus elektrosztatikai képből kiindulva a felület fogalmi megközelítésében a felületi kettősrétegek egyensúlyi feltételének termosztatikai tárgyalásán át a szerzők eljutnak a kémiai és az elektrokémiai potenciál statisztikus (mikroszkopikus) megalkapozásáig (félvezetők felületi egyensúlyának feltétele az elektrokémiai potenciál állandó volta). Külön-külön elemzik a fémek, a félvezetők és a szigetelők esetén a felületek érintkezése következtében kialakuló, egymástól lényegesen különböző potenciál- és töltéviszonyokat, illetve a felületi állapotok szerepét.

A tanulmány második fejezete ismerteti az atomosan tiszta felületek előállítási módjait, és a felületi adszorpció alapvető folyamatainak rövid áttekintése után az elektronsugaras felületvizsgálatnak a felület stabilitására gyakorolt hatásával foglalkozik, kitérve a szigetelők elektronbombázás hatására történő roncsolódására. A harmadik fejezet áttekint azokat a kölcsönhatásokat (külső elektromos tér, fotonok, kisenergiájú elektronok és a szilárd testek felületei között), amelyek felhasználásával a felületek jellemzői (Fermi-nívó, kilépési munka, felületi állapotsűrűség stb.) meghatározhatók.



Az egyik leghatékonyabb felületvizsgáló módszerrel, a fotoelektronspektroszkópiával (XPS, UPS) foglalkozik *Berényi Dénes* e kötetben megjelent második tanulmánya. A szerző az elvi alapok és a felületvizsgálaton kívüli fő alkalmazási területek (kémiai szerkezetvizsgálat, molekulapályák és szilárdtest sávszerkezet vizsgálata) rövid ismertetése után számos példával illusztrálja a szilárdtestek felületén végbemenő adszorpció, oxidáció, valamint katalízis vizsgálati lehetőségeit és az e téren elért eredményeket. Az adszorpció jelenségeinek nyomonkövetésében az XPS (röntgen-gerj.) és az UPS (UV-gerj.) kiegészíti egymást, míg az oxidáció és a katalízis esetében inkább az XPS alkalmazása dominál.

A szerző az XPS analitikai jelentőségéről szólva kiemeli, hogy noha a módszer érzékenysége egyes elemek esetén nagyságrendekkel elmarad más módszerekétől (SIMS), azonban a teljes rendszám-tartományban maximálisan egy 10-es faktoron belül változik. Ugyanakkor az XPS lehetővé teszi a felületi rétegek mélységi analizisét anélkül, hogy azokat eltávolítanánk. A tanulmányt a szóban forgó módszerek műszeres technikájával kapcsolatos megjegyzések és értékelés zárják.

A szekunder-ionemissziós tömegspektroszkópia (SIMS) felületvizsgálatokban való alkalmazásáról szól a kötet befejező tanulmánya, melyet *Vargáné Josepovits Katalin* és *Pavlyák Ferenc* írtak. A szerzők a módszer általános jellemzői bemutatásánál nemcsak elvi, történeti bevezetésre és a kísérleti technika ismertetésére töreksenek, hanem kitérnek a módszer főbb típusaira és a kereskedelemben is hozzáférhető berendezésekre is. A kvantitatív és a kvantitatív analízis lehetőségeit elemezve megállapítják, hogy az utóbbi alkalmazáshoz szükséges paraméterek elméletileg származtatott vagy kísérletileg mért értékei nem haladják meg a nagyságrendi becslés szintjét, és standard minták sem alkalmazhatók általában az erős mátrixeffektus miatt. Kedvező lehetőséget jelent a kvantitatív analízisre a reaktív porlasztás (megemelt oxigénnyomás mellett végzett SIMS vizsgálat), amely számos ötvözet esetén csökkenti a mátrixeffektust, és jelentősen javítja a pozitív ionspektrum intenzitását (a minta eredeti oxigéntartalmára azonban ilyen módon nem lehet következtetni).

A SIMS-módszer széles körű gyakorlati felhasználhatóságát a szerzők számos saját mérési eredménnyel szemléltetik a laterális eloszlásvizsgálatokkal és az ionbombázásos mélységi koncentrációeloszlás-vizsgálatokkal (dinamikus SIMS) kapcsolatban. További példák demonstrálják a SIMS alkalmazhatóságát (a felületvizsgáló módszerek többségével ellentétben) a hidrogén kimutatására, a felületi kémiai reakciók és egyes esetekben az oxidációs állapot meghatározására.

A tanulmányok szinte egyöntetűen felhívják a figyelmet a modern felületvizsgáló módszerek egy sor közös sajátására (vákuumigény, felülettisztítási, mintapreparálási módok stb.) és egymást kiegészítő jellegére. Mindez kézenfekvővé teszi e módszerek komplex alkalmazását, komplex berendezések kifejlesztését és használatát.

A kötet kivitele (eltekintve a néhány értelemzavaró sajtóhibától és egyes példányok hibás fűzésétől) színvonalas. Nemcsak a felületvizsgáló módszerek iránt érdeklődők és az alkalmazók számára hasznos olvasmány, mindazoknak ajánljuk, akik még nem ismerik az említett módszerek rendkívül gazdag felhasználási lehetőségeit.

*Kövér László*

## Gergely György (szerk.): Szilárdtestfelület-vizsgálatok új módszerei II.

A Szilárdtestkutatás Újabb Eredményei 6.

Akadémiai Kiadó, Budapest, 1979

A 274 oldalas kötet két tanulmányt tartalmaz: *Menyhárd Miklós* a kis energiájú elektron-diffrakcióra (LEED), *Gergely György* pedig a szekundér emissziós spektrometria különböző fajtáira (AES, SEES, ELS) vonatkozó jelenlegi ismereteinket tekinti át.

*Menyhárd Miklós* a felületek termodinamikai tárgyalásából indul ki, ismertetve a Gibbs-féle adszorpciók egyenletét és a szegregációs egyenletet, majd a kétdimenziós rácsok szimmetria tulajdonságaival foglalkozik. Erre a hosszabb és mélyebb alapozásra azért van szükség, hogy megismerjük azokat a fogalmakat és mennyiségeket, valamint a közöttük érvényes összefüggéseket, amelyekről a LEED (Low Energy Electron Diffraction) segítségével információkat kaphatunk. Ez utóbbi módszerrel, amelynél a primér elektronok energiája a 20–500 eV (legtöbbször 50–150 eV) tartományba esik, a felület 1–3 atomi réteg vastagságú tartományát vizsgáljuk.

A LEED-mérésekben nemcsak a rugalmasan visszaszórt elektronok térbeli eloszlását (diffrakciós maximumok elhelyezkedése, az ún. diffraction „pattern”), de a maximumok intenzitás viszonyait, sőt mindezek energia és szögfüggését is meghatározzuk egykristály minták esetében. Ezeknek a kísérleti adatoknak a részletes értelmezésére és így az atomok felületi elrendezésének meghatározására az ún. kinematikai elmélet nem kielégítő, erre csak a többszörös szórást figyelembe vevő



dinamikus elmélet alkalmas. A tanulmányban egy-egy külön fejezet van szentelve ezeknek az elméleteknek és egy további a hőmérsékleti effektusoknak. Rövid fejezet tárgyalja még a kísérleti technikát és a legvégén egy a másik rugalmatlan kis energiájú elektrondiffrakciót (ILEED). (Itt jegyezzük meg, hogy érdemes lett volna az ILEED-hez hasonló terjedelemben foglalkozni a RHEED — Reflection High Energy Electron Diffraction — nagy energiájú elektron diffrakciós módszerrel is.) Még az ILEED tárgyalása előtt — egy hosszabb fejezetben — foglalkozik a tanulmány a LEED-módszer alkalmazásaival. Itt számos példát említ, amelyekben a felület szimmetriája, az egyes atomok helye, a felülettel párhuzamos atomi rétegek távolsága, a felületi atomok rezgésállapotai, illetve ezek meghatározása játszik szerepet. Két konkrét példát részletesebben is elemez: az egyik a heterogén katalízis vizsgálata (itt a kemisorpció során adszorbeált atomok helyének ismerete a döntő kérdés), a másik a vas korróziója (az oxidáció kezdeti szakasza itt is kemisorpció).

A tanulmány során a szerző mindig igyekszik a LEED helyét kijelölni a más felületvizsgáló módszerek között, különösen törekszik a nagy energiájú elektrondiffrakciós (primér energia 20–100 keV) és a röntgendiffrakciós szerkezet vizsgálat között a LEED helyét kijelölni. Hangsúlyozza, hogy a LEED igazán eredményesen más modern felületvizsgáló módszerekkel együttesen használható. Így aligha végezhető ma már LEED-vizsgálat a felület tisztaságának előzetes ellenőrzése nélkül, pl. Auger-spektroszkópiával.

Gergely György néhány oldalas bevezetéssel kezdi a szekundér emissziós spektrometriai módszerek áttekintését, amelyben ismerteti a szekundér emisszió jelenségeit és sorban említést tesz a szekundér emissziós spektroszkópia számos válfajáról. Az Auger- és egyéb emissziós folyamatokkal később külön fejezetben is foglalkozik. Ugyancsak külön fejezetet szentel a kísérleti technika részletes ismertetésének.

Ezután egy-egy fejezetben tárgyalja az egyes fontosabb szekundér elektron spektroszkópiai módszereket. A rugalmas csúcs közelében helyezkednek el, attól mindig konstans távolságra (függetlenül a primér elektronok energiájától, azaz a rugalmas csúcs helyétől) az ún. veszteségi csúcsok. Az elektron-energiavesztési spektroszkópiával (ELS) a felületeknek elsősorban nem az elemi összetétele állapítható meg, hanem különböző szennyező anyagok jelenléte mutatható ki. Pl. meghatározható, hogy összefüggően vagy szigetszerűen, ill. milyen százalékban borítja a felületet oxigén, szén, vagy éppen hidrogén.

A gerjesztési potenciál (a bombázó elektron energia) változtatásánál az atomi nívóknál jelentkező abszorpciós maximumokat használja ki a gerjesztési potenciál spektrometria (APS) az atomi nívók, pl. oxidáció következtében jelentkező eltolódásának vizsgálatára.

A tanulmány legrészletesebben az Auger elektron spektrometriával (AES) foglalkozik, külön fejezetben tárgyalva röviden az ion-gerjesztéses, majd részletesen a kvantitatív és a tömbi AES-t. Ez utóbbi fejezetben esik szó a mélységi eloszlás meghatározásáról (elsősorban  $\text{Ar}^+$  ion marással), továbbá a diffúzió és szegregáció vizsgálatáról.

Végül egy viszonylag hosszú fejezet van szentelve a műszaki alkalmazásoknak, amelyek közül a legfontosabbak: a híradástechnikai alkatrészgyártás, a kohászat, a katalízis és a korrózió nyomomkövetése, de az alkalmazási terület olyan széles, hogy itt teljességre törekedni szinte lehetetlen.

A tanulmányt, amelyik hasznos bevezetés mindenkinek, aki a szóban forgó módszereket meg akarja ismerni, az elején egy a legfontosabb jelöléseket összefoglaló jegyzék is kiegészíti.

Berényi Dénes

#### P. Grosse: Freie Elektronen in Festkörpern Springer-Verlag, 1979

A könyv részletesen és egyszerű intuitív mikroszkopikus modellek alapján tárgyalja a félvezetőkben és fémekben lejátszódó elektronokkal kapcsolatos jelenségeket. A kifejtés alapját a klasszikus fizika, nevezetesen a Drude–Lorentz-modell képezi: mint a szerző az előszóban írja, „nem azért, hogy a használtcikk-piac ideológiai szellemében visszatérjünk a nagymama rekvizitumaihoz, mivel az új, tökéletesített módszerekkel nem boldogulunk. Szándékom inkább az volt, hogy a kezdőkkel és nem-specialistákkal beláttassam, hogy oly nagyszámú és különböző jelenségek, mint vezetőképesség, fényabszorpció, diffúzió, plazmaél, Hall-effektus, Faraday-effektus, helikon-hullámok, stb. kényszerítően következnek abból a tényből, hogy a részecskékre elektromágneses terekről származó erők hatnak.”

Az elektron kvantummechanikai tulajdonságai az effektív tömeg használatával és a Fermi–Dirac-statisztika alkalmazásával vannak figyelembe véve.

A könyv különös érdeme, hogy részletesen foglalkozik a részecskék és elektromágneses terek kölcsönhatása következtében kialakuló, olyan kvázirészecskékkal, mint a fonon-polariton, plazmon-fonon-polariton, magneto-plazmon-fonon-polariton.



Az első nyolc fejezetnek a transzportjelenségek vizsgálása a tárgya. A további fejezetek témái: A dinamikus vezetőképesség; Elektromágneses hullámok terjedése kondenzált anyagban; Vezetők optikai tulajdonságai; Vezetők magneoptikai tulajdonságai; Az elektron-fonon csatolás. A könyvet egy terjedelmes függelék zárja „Elektromágneses hullámok terjedése kondenzált anyagban” címmel.

A könyv több érdekes, kifejezetten gyakorlati alkalmazás elméleti alapjaival is foglalkozik, ilyenek pl. az átlátszó „hőtükör”, a Waltersdorff-réteg stb.

Grosse professzor műve ajánlható mindazoknak, akik az elektronfizikával a fizikai lényegre koncentrálni akarnak megismerkedni; a szerzőnek a matematikai apparátussal való mértéktartó bánásmódja ehhez nagy segítséget nyújt.

Rácz Sándor

**F. Rosenberger: A kristálynövesztés alapjai I.  
Springer-Verlag. Szilárdtest tudományok sorozata 5. kötet**

A szerző terve szerint három kötetben kívánja megalapozni a kristálynövesztés határtudományát. A kristálynövesztés az utóbbi évtizedekben önállósult és felöleli a szilárdtestfizikai, szilárdtestkémiai, termodinamikai, statisztikus mechanikai, folyadékdinamikai, analitikai és preparatív kémiai, felületfizikai és kémiai, krisztallográfiai és elektrokémiai, valamint a technikai ismeretek széles halmazát. Ez az interdiszciplináris tudomány szétszórta hozzáférhető ismereteivel nehézségek elé állítja mind az oktatót, mind a tanulókat. A szerző mind az oktatásban, mind a kristálynövesztésben szerzett bő tapasztalataira alapozva kísérli meg összeállítani a kristálynövesztéshez szükséges ismereteket, egyensúlyban tartva az egyes részeket.

A jelen első kötet lényegében a fizikai—kémiai alapokat nyújtja öt fejezetben, ezek:

1. Termodinamika
2. Fázis egyensúlyok és fázisdiagramok
3. Kristálynövekedés és fázisdiagramok
4. Tömeg és hő transzport
5. Szegregáció.

Az egyes fejezetekhez az anyagot a gyakorlott kristálynövesztő szemével válogatja össze, ügyelve arra, hogy elmélet és gyakorlat ne szakadjon el egymástól. Minden fejezethez az olvasó számára megoldandó feladatokat és bőséges irodalmi utalást ad.

A készülő második kötetben a növekedés kinetikáját, valamint morfológiáját fogja tárgyalni az a témakörhöz tartozó elméleti megfontolásokkal és modellekkel.

A harmadik kötetben a kristálynövesztés technikáját kívánja tárgyalni, rámutatva azokra a technikai lehetőségekre, amelyek gyakran kompromisszumra készítetik a kristálynövesztő szakembert.

Úgy vélem, hogy a háromkötetes mű, amelynek első kötetét most kézbe vehettem, mind a gyakorlatban tevékenykedő kristálynövesztő szakembereknek, mind a szakember képzésnek alapkönyvévé fog válni. (V. R.)

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Marton Andor

A kézirat nyomdába érkezett: 1980. II. 20 — Terjedelem: 9,1 (A/5 ív)

80-851 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató

MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADEMIA  
KÖNYVTÁRA





## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Radnai Tamás</i> : Az alkáli kloridok vizes oldatainak szerkezetvizsgálata röntgendiffrakcióval	339
<i>Tarnóczy Tamás</i> : A Magyar Tudományos Akadémia akusztikai mérőhelyiségeinek műszaki adatai	377
<i>Illényi András és Korpássy Péter</i> : Zavaró visszhangok kiküszöbölése süket szobái méréseknél	399

## A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>P. A. M. Dirac</i> : A diszperzió kvantumelmélete	415
--	-----

## KÖNYVISMERTETÉSEK

<i>B. A. Robson (ed.)</i> : Nuclear Interactions	431
<i>H. Arenhövel, D. Rechsel</i> : Nuclear Physics with Elektromagnetic Interactions	432
<i>A. F. Ranada (ed.)</i> : Nonlinear Problems in Theoretical Physics	433
<i>T. Tamir (ed.)</i> : Integrated Optics	434
<i>A. Weber (ed.)</i> : Raman Spectroscopy of Gases and Liquids	434
<i>Jean Cea</i> : Lectures on Optimization — Theory and Algorithmus	434
<i>B. K. Agarwal</i> : X-Ray Spectroscopy	435
<i>I. I. Sobelman</i> : Atomic Spectra and Radiative Transitions	435
<i>Landolt—Börnstein</i> : Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology	436
<i>M. B. Salamon (ed.)</i> : Physics of Superionic Conductors	436
<i>Jerzy Kijowski, Włodzimierz M. Tulczyjew</i> : A Symplectic Framework for Field Theories	437
<i>M. D. Scadron</i> : Advanced Quantum Theory and Its Applications Through Feynman Diagrams Texts and monographs in physics Springer-Verlag, 1979	437
<i>A. J. Chorin, J. E. Marsden</i> : A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics	438
<i>Fazekas Patrik</i> : Antiferromágnesség és szimmetria sértés	438
<i>Watterich Andrea</i> : Ponthibák adalékolt alkálihalogenidekben	438
<i>Gergely György (szerk.)</i> : Szilárdtestfelület-vizsgálatok új módszerei I	439
<i>Gergely György (szerk.)</i> : Szilárdtestfelület-vizsgálatok új módszerei II	440
<i>P. Grosse</i> : Freie Elektronen in Festkörpern	441
<i>F. Rosenberger</i> : A kristálynövesztés alapjai I	442

307 226

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

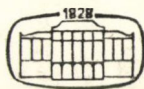
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR  
ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
PÁL LÉNÁRD

XXVIII. KÖTET

5-6. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1980



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10-10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár

Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII. Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 72 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetet és főbb lépéseit közölnék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

# NAGYFELBONTÓKÉPESSÉGŰ Ge/Li DETEKTOROK KIDOLGOZÁSA S ALKALMAZÁSUK GERJESZTETT MAGNÍVÓK ÉLETTARTAM MÉRÉSÉRE DOPPLER EFFEKTUS FELHASZNÁLÁSÁVAL\*

UCHRIN JÁNOS

Paksi Atomerőmű Állami Indító és ellenőrző átvételi Bizottság  
Ipai Minisztérium

## TARTALOM

BEVEZETÉS .....	444
1. FÉLVEZETŐ GAMMA SPEKTROMETRIAI DETEKTOROK .....	446
1.1. $\gamma$ -kvantum energiájának mérése szolgáló alapvető módszerek .....	446
1.2. Gamma-kvantumok kölcsönhatása szilárdtesttel .....	450
1.3. Szilárdtest ionizációs kamrával végzett energiamérés korlátozó tényezői .....	455
1.3.1. Töltés-keltési folyamat .....	455
1.3.2. Fano faktor .....	457
1.4. Nagytérfigatú Ge/Li detektorok előállításának elvi alapjai .....	458
1.4.1. n-i-p struktúra létrehozása germániumban .....	458
1.4.2. Litium diffúziója és driftje germániumban .....	460
1.4.3. Germánium—lítium rendszer .....	463
1.4.4. Germánium—oxigén rendszer .....	466
2. NAGYFELBONTÓKÉPESSÉGŰ Ge/Li DETEKTOR KIALAKÍTÁSA ÉS ENNEK KAPCSÁN VÉGZETT VIZSGÁLATOK .....	468
2.1. n-i-p detektor készítésére alkalmas germánium főbb jellemzőinek meghatározása .....	468
2.1.1. Kisebbségi töltéshordozók koncentrációja és élettartama .....	468
2.1.2. Kristályszerkezet jellemzői és kristályhibák .....	469
2.1.3. Oxigén koncentráció és előfordulási formája .....	472
2.2. n-i-p struktúra előállításával kapcsolatos kísérleti eljárás .....	474
2.2.1. Ge/Li detektorok készítéséhez felhasznált alapanyag jellemzők .....	474
2.2.2. Germánium előkészítése diffúzióhoz .....	475
2.2.3. Li diffúziója germániumban .....	477
2.2.4. Driftelés .....	480
2.2.5. Clean-up eljárás .....	481
2.2.6. Detektor előkészítése tokozáshoz .....	481
2.2.7. Ge/Li detektor tokozása, szerelése, hűtése .....	483
2.3. n-i-p struktúra kialakításával kapcsolatos vizsgálatok .....	483
2.3.1. Nagyhőmérsékletű drifteléssel kapcsolatos eredmények .....	483
2.3.2. Clean-up vizsgálatok eredményei .....	486
2.3.3. Ge/Li rendszer kísérleti vizsgálata .....	491
2.3.4. Diszlokációk hatása .....	492
2.3.5. A fajlagos ellenállás hatása .....	493
2.4. Ge/Li detektorok készítéséhez felhasznált germánium optikai és rekombinációs tulaj- donságainak vizsgálata .....	493
2.4.1. Germánium transzmissziós vizsgálata .....	493
2.4.2. Kísérleti eredmények értelmezése .....	495
2.5. Ge/Li detektorok alkalmazástechnikai vizsgálatával kapott eredmények .....	497
2.5.1. A Ge/Li detektor üzemeltetési paramétereinek meghatározása .....	497
2.5.2. Kísérleti eredmények gyakorlati felhasználása .....	500

\* Kandidátusi értekezés. Érkezett 1979: június 21.



3. GERJESZTETT MAGNÍVÓK ÉLETTARTAMÁNAK MÉRÉSE DOPPLER-EFFEKTUS FELHASZNÁLÁSÁVAL .....	506
3.1. Doppler-effektus magfizikai alkalmazása .....	507
3.1.1. Doppler eltolódás gyengítésének módszere .....	508
3.1.1.1. DSA eljárás alapjai .....	508
3.1.1.2. DSA módszer kísérleti eredményei .....	509
3.1.2. Recoil-distance módszer .....	512
3.1.2.1. Kísérleti technika és eredmények .....	514
3.1.2.2. Nehéz target magokkal végzett kísérletek .....	515
3.1.2.3. Következtetés .....	516
3.2. Nehéz ionokkal gerjesztett magok élettartamának mérése Doppler-effektus felhasználásával .....	516
3.2.1. A vizsgálati eljárás kísérleti megvalósítása .....	516
3.2.1.1. Targetet és plünger magában foglaló kamra .....	517
3.2.1.2. Doppler eltolódás mérésére szolgáló Ge/Li detektor .....	518
3.2.1.3. Detektor-kriosztát konstrukciós tulajdonságai .....	519
3.2.1.4. Ge/Li detektorral kapott mérési eredmények .....	521
3.2.2. $^{160}\text{Er}$ nívóinak élettartam vizsgálata .....	521
3.2.3. $^{164}\text{Yb}$ rotációs nívóinak élettartam meghatározása .....	524
3.2.3.1. Kísérleti megvalósítás .....	524
3.2.3.2. A mérési adatok feldolgozása .....	525
3.2.4. Kísérleti eredmények .....	530
ÖSSZEFOGLALÁS .....	530
IRODALOM .....	531

## BEVEZETÉS

Félvezető nukleáris detektorok jelenleg kiemelkedő helyet foglalnak el a mag-sugárzások spektrometriai és dozimetriai alkalmazásával kapcsolatban, a tudományos kutatás és műszaki fejlesztés különböző területein. Két évtizede amikor az első Si alapanyagú detektor megjelent, csak a tudomány olyan szakterületein teremtett minőségileg új perspektívát, ahol a kutatások fő tárgyát a különféle sugárzások tanulmányozása jelentette. Ugyanakkor jelenleg a különféle típusú félvezető detektorok alkalmazásaira intenzív módon járulnak hozzá a magfizikai módszerek olyan területeken történő elterjedéséhez mint például a geológia, medicina, mezőgazdaság, kriminalisztika, kémia, gépípar...

Azokon a területeken, ahol a sugárzás a folyamatok információ-hordozója (atomtechnika, kozmosz, transzuránelemek szintézise stb.) a félvezető detektorok alapvető kísérleti eszközzé váltak. Az atommag szerkezetének, továbbá a magon belüli folyamatok kutatásának eredményessége közvetlen kapcsolatban van a félvezető detektorok minőségével, illetve detektor alapanyagokkal kapcsolatos munkák jövőbeni helyzetével.

Félvezető detektorok főbb jellemzői: igen jó felbontóképesség, gyors impulzus felfutás, mágneses térrel szembeni érzéketlenség, erősen ionizáló sugárzások regisztrálásának lehetősége (pl.  $\alpha$ -részecskék vagy hasadványok mérése  $\gamma$ -háttér esetén), detektorok alkalmazhatósága számlálási üzemmódban zárófeszültség nélkül  $\gamma$ -sugárzás detektálása néhány tíz eV-tól — 10–15 MeV-ig, detektor konfigurációk széles skálája, hordozhatóság.

A szilárdtest ionizációs kamrák felhasználása különösképpen a  $\gamma$ -spektrometria területén jelent hatalmas előnyt, mivel a korábban alkalmazott berendezések közül a



kristálydifrakciós spektrométer, továbbá a konverziós mágneses spektrométer nagy felbontóképességük mellett kis hatásokkal rendelkeznek, s csak egysátnás rendszerként voltak alkalmazhatók, míg a szcintillációs detektorok nagy hatásfokuk és sokcsátnás tulajdonságuk mellett gyengébb felbontóképességgel rendelkeztek.

A félvezető detektor sokcsátnás jellege és kiemelkedően jó felbontóképessége következtében képes volt betölteni a két korábbi típus közötti gap-et, ezzel ugrásszerű fejlődést biztosított a  $\gamma$ -spektroszkópia területén.

Jelenleg a Si és Ge alapanyagból készült spektrometriai detektorok terjedtek el. A germánium vezető szerepe vitathatatlan, mivel specifikus paramétereinek összessége — rendszám, tiltott sáv szélessége, töltéshordozók mozgékonyasága — lehetővé teszi jó felbontóképességű spektrometriai rendszerek készítését széles  $\gamma$ -energia tartományban.

Az első Ge-ból készült spektrometriai detektorról *Freck* és *Donoven* számoltak be [1] 1962-ben. Ezt követően a Ge-ból készült szilárdtest ionizációs kamrák, a *Pell* által bevezetett Li-ion drift technika alkalmazásával a világ számos, elsősorban magfizikai laboratóriumaiban, gyors ütemben készültek [2, 3, 4] — ezzel megindult a velük kapcsolatos vizsgálat is.

Ezek az érzékelők a  $\gamma$ -spektrometria területén jelen időben is a magfizikai vizsgálatok elsődleges eszközei maradtak. Így a kísérleti munkánk eredményeként létrehozott nagyfelbontóképességű Ge/Li detektor-rendszer — dolgozatomban tárgyalt magfizikai alkalmazása — lehetővé tette magnívók élettartam mérését a  $10^{-10}$ — $10^{-12}$  sec tartományban. Ez a rotációs magmodell kísérleti úton történő ellenőrzésére adott lehetőséget.

Fenti intervallumba eső élettartamok direkt mérése pulzáló-nyalábbal vagy késleltetett koincidenca módszerével nehézségbe ütközik, ezért szokásos a gerjesztett nehéz magok lebomlásakor vizsgálni a mozgásban lévő, illetve a szilárdtestben lefékeződött emittáló magok  $\gamma$ -spektrumát: ez a gyakorlatban az emittált  $\gamma$ -sugárzás Doppler eltolódásának mérését jelenti.

A nehéz ionokkal létrehozott nagy impulzusmomentumú reakciók lehetővé teszik új magok osztályának vizsgálatát, Doppler-effektus felhasználásán alapuló recoil distance módszerrel történő élettartam méréssel. E metodika az elektronikus időmérés és a DSA mérési mód közötti gap-et hidalja át  $\tau = 10^{-10}$ — $10^{-12}$  sec mérési tartománnyal.

A módszer gyakorlati megvalósítása szükségessé tette olyan  $\gamma$ -energia mérőrendszer létrehozását, amely  $E_\gamma = 100$ — $600$  keV energia-tartományban eléri az 1,2—1,7 keV felbontóképességet — ami előfeltétele a gerjesztett magok által emittált  $\gamma$ -sugárzás Doppler eltolódása kimérésének.

Szilárdtest detektorokkal kapcsolatos kutatásaink arra irányultak, hogy a Li-ion drift technika alkalmazásával olyan n-i-p struktúra jöjjön létre germániumban, melyben a szennyezéskoncentráció kompenzálása tökéletes. Az általunk ilyen irányban végzett kutatási munkák lehetővé tették p-típusú Ge alapanyag felhasználásával olyan szilárdtest detektorok létrehozását, amelyek a kiinduló alapanyaggal szemben támasztott kritériumok teljesülése esetén nagy felbontóképességgel rendelkeznek, s alkalmasak olyan mérések elvégzéséhez, mint a Doppler-effektus felhasználásán alapuló élettartam meghatározás, az eddig fehér foltként kezelt időintervallumban.

A dolgozat ebben az irányban végzett vizsgálatokkal foglalkozik s három fejezetből áll:



Az első fejezet tartalmazza a gamma spektrometriai eszközök, érzékelők összehasonlítását, irodalmi összefoglalását. Elemzésre kerül a gamma-sugárzás és szilárdtest kölcsönhatása — mely meghatározza a szilárdtest detektor hatásfokát. Megvizsgáljuk a félvezető detektorok spektrometriai tulajdonságát meghatározó faktorokat, melyek kapcsolatban vannak a gamma-sugárzás által keltett töltéshordozók fluktuációjával, élettartamával. Megvizsgáljuk az alapanyaggal szemben támasztott követelményeket — elsődlegesen az ion-drift technika megvalósítása szempontjából.

A második fejezet tárgyalja a germániumból készített Ge/Li spektrometriai detektorok optimális technológiai megvalósításához szükséges anyag jellemzőket. Ennek keretén belül megvizsgáljuk a p-n átmenet erőterében kialakított n-i-p struktúra főbb technológiai fázisait. Összegezzük a Ge/Li detektor hosszúidejű üzemeltetését biztosító kriosztát — Dewar rendszerrel kapott eredményeket. Tárgyaljuk az ion-drift technikával készülő Ge/Li detektorok  $\gamma$ -spektrometriai jellemzőit. Kitérünk a különböző eljárással készült, germániumban végzett driftelés eredményeinek korrelációs vizsgálatára — az infravörös tartományban végzett transzmissziós vizsgálatok és élettartam mérések alapján.

A harmadik fejezet a szerző által kialakított nagyfelbontóképességű Ge/Li spektrometriai rendszer gyakorlati alkalmazását mutatja be. A nehéz ionokkal gerjesztett magnívók élettartamának mérése Doppler-effektus felhasználását alkalmazó módszerrel történt. A  $10^{-10}$ — $10^{-12}$  sec élettartam intervallumban végzett mérés a Li-driftelt, nagyfelbontóképességű Ge/Li detektor kifejlesztésével vált lehetővé. Az eddig fehér foltként szereplő tartományban sikerült meghatározni  $^{160}\text{Er}$  és  $^{164}\text{Yb}$  magok gerjesztett nívóinak élettartamát, s így vizsgálataink eredményeivel a rotációs magmodell alátámasztására szolgáltatunk újabb kísérleti adatokat.

## 1. FEJEZET

### FÉLVEZETŐ GAMMA SPEKTROMETRIAI DETEKTOROK

#### 1.1. $\gamma$ -kvantum energiájának mérésére szolgáló alapvető módszerek

##### *Bevezetés*

Magfizikai alap kutatások, izotóptechnikai vizsgálatok és mérések jelentős része a gamma-sugárzás spektrumának analízisén alapul. A kapott eredmény nagymértékben függ a gamma-spektrumból levonható információ mennyiségétől és annak pontosságától.

A terület ugrásszerű fejlődését elősegítő félvezető  $\gamma$ -spektrometriai detektorok szerepének megvilágítására célszerű megadni az eddigi módszerek által nyerhető információ összefoglaló értékelését. A  $\gamma$ -kvantum energiájának mérésére szolgáló alapvető módszerek összehasonlításánál a spektroszkópiai vizsgálatok szempontjából elsődleges paraméterek:

- felbontóképesség, mely a vizsgálandó spektrum komplexitásának szab határt;
- detektálási hatásfok, mely a forrás erősségét determinálja;
- információ akkumuláció sebessége, mely az alkalmazhatóságának szab határt: (időtényező!) pl.: rövid felezési idő; élettartam mérés.



*Gamma-spektrometriai rendszerek értékelése*

A  $\gamma$ -spektroszkópia kifejlődése szempontjából döntő jelentőségű kristály-diffrakciós és külső elektron-konverziós mágneses spektrométerek az 1950-es évek táján jelentek meg. A kristály-diffrakciós spektrométerrel végzett energiamérés nagy felbontóképességgel rendelkezik, különösen 180 keV alatti tartományban, azonban a rendszer felbontóképessége az energia növekedésével rohamosan csökken. A kristály-diffrakciós spektrométerek hatásfoka  $\sim 1/E^2$ -nek megfelelően csökken, s a használatos spektrométerek közül a legkisebb. E rendszer további hátránya: egycsatornás jellege.

Összehasonlítva a fenti rendszert a Ge/Li gamma-spektrometriai rendszerrel, a  $^{177m}\text{Lu}$  izotóp esetén felvett spektrumok — 1.1 ábra — jól mutatják a Ge/Li rendszer előnyét. Az információ akkumuláció sebességére jellemző, hogy a kristály-diffrakciós egycsatornás spektrométerrel felvett spektrum 6 hónapos mérési időt és 100 mCi erősségű forrást igényelt, míg a  $0,5\text{ cm}^3$  érzékeny térfogatú Ge/Li detektorral felvett spektrum mérési ideje 1 nap; forráserősség igénye 1 mCi. [5]

A külső elektron-konverziós mágneses spektrométer lényegében egy  $\beta$ -spektrométert foglal magában, mely nehéz elem radiátorból kilépő fotoelektronokat analizálja. Ez a rendszer ugyanazokkal a hátrányokkal rendelkezik, mint a kristály-diffrakciós spektrométer: egycsatornás jellege és kicsiny hatásfoka — melyet a geometrikai hatásfok, a konvertáló anyag fotoelektromos hatáskeresztmetszete, a fotoelektronok szögeloszlása határoz meg — nehézkessé teszi alkalmazását. Felbontóképessége csak 200 keV alatt haladja meg a Ge/Li detektor felbontóképességét. 1 MeV-s gamma-energia esetén az elérhető felbontóképesség 3 keV; ez nagyságrenddel jobb, mint a kristály-diffrakciós spektrométerrel elérhető 30 keV-s félértékszélesség.

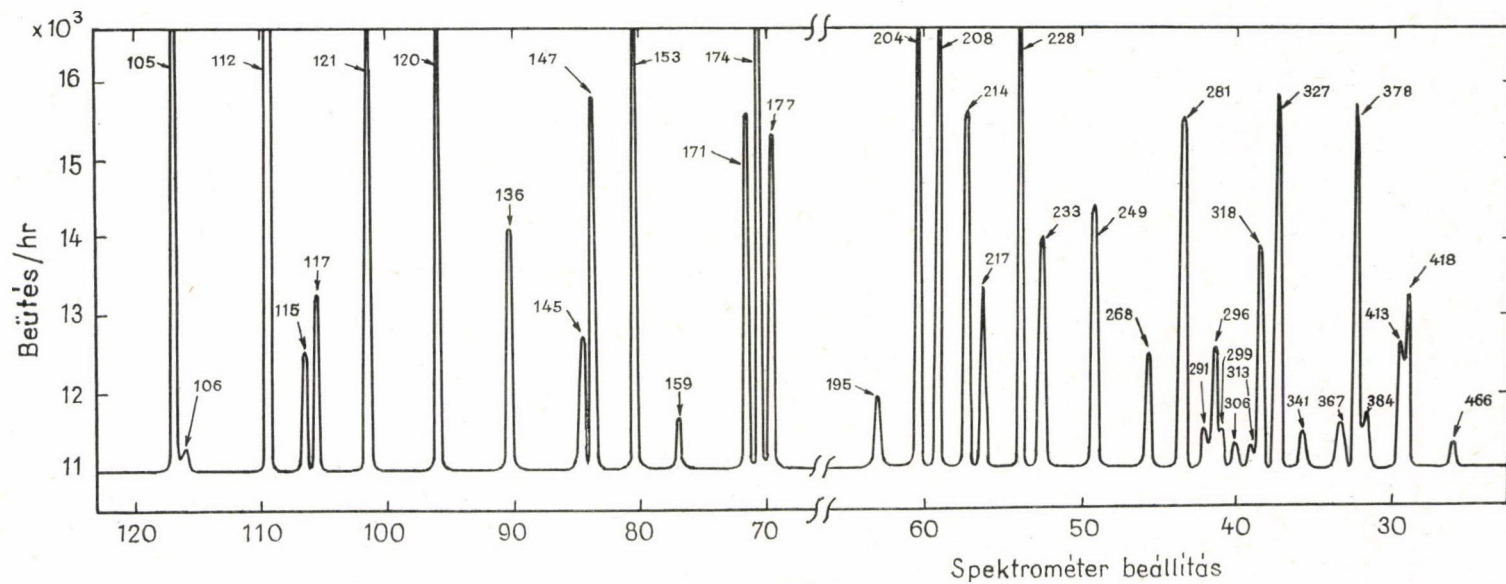
Az elmúlt évtizedet uraló, a NaJ(Tl) szcintillációs kristállyal megépített  $\gamma$ -spektrometriai rendszer széleskörű felhasználását relative jó felbontóképessége, igen nagy hatásfoka és sok-csatornás jellege tette alkalmassá. Gamma-kvantum energiamérésére 5 keV felett használható — felbontóképessége 0,1 MeV-nél 20 keV, 1 MeV-nél 60 keV. Ezek közel másfél nagyságrenddel rosszabbak, mint a Ge/Li detektorral kapott felbontás értékek. A félvezető detektorral kapott, minőségileg új információt jól szemlélteti az 1.2. ábrán bemutatott  $^{110m}\text{Ag}$  spektruma. Hatásfok tekintetében azonban a szcintillációs detektorok jelentős mértékben meghaladják a Ge/Li detektorok hatásfokát. Még a leggyakrabban használt  $3'' \times 3''$  méretű NaJ(Tl) kristály csúcshatásfoka is abszolút értékben egy nagyságrenddel nagyobb, mint egy  $54\text{ cm}^3$  érzékenytérfogatú Ge/Li detektor hatásfoka.

Az 1960-as években egyre gyorsabb ütemben fejlődő és széles körben alkalmazást nyerő félvezető detektorok adták a magspektroszkópusok kezébe azt az új gamma-energiamérő eszközt, amely forradalmasította a magspektroszkópiát, s lehetővé tette — az értekezésben tárgyalt — a magnívók tanulmányozásával kapcsolatos gamma-spektroszkópia megvalósítását.

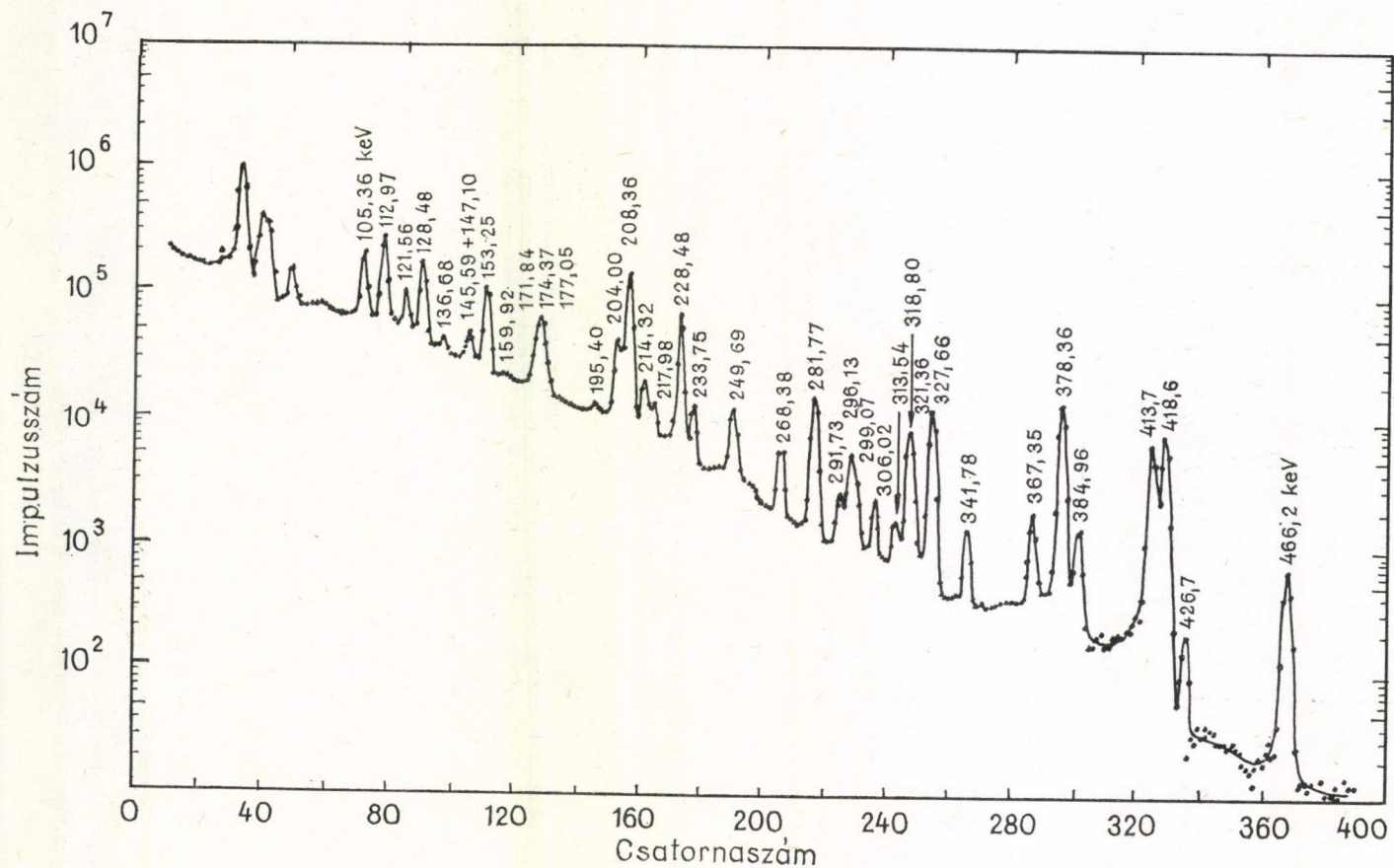
Az új energiamérő eszköz nagy felbontóképessége, jó hatásfoka, sok-csatornás jellege képes volt betölteni azt a spektrométer gap-et, amely a kiváló felbontóképességű, de rendkívül rossz hatásfokú kristály-diffrakciós és mágneses spektrométerek, továbbá a nagy hatásfokú, de mérsékelt felbontóképességű NaJ(Tl) szcintillációs spektrométerek között jelentkezett.

Az 1.3 és 1.4 ábrák mutatják a különböző energiamérő rendszerek hatásfokát és felbontóképességét a gamma-energia függvényében.

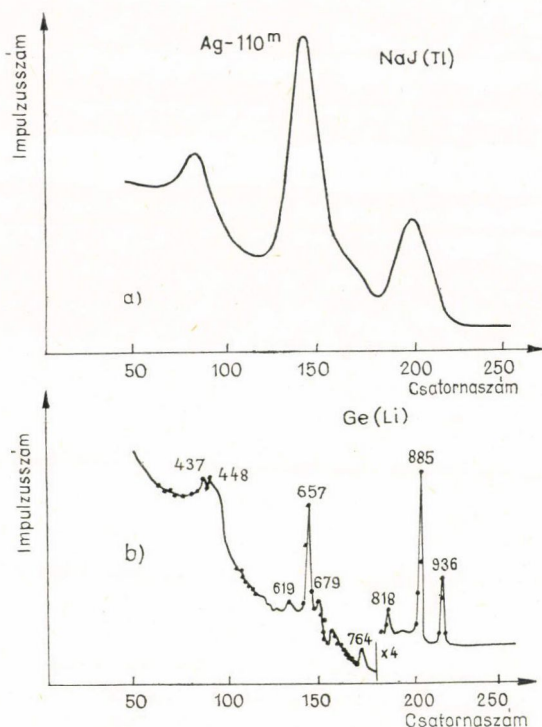




I/a) ábra.  $^{177m}\text{Lu}$  kristály diffrakciós spektrométerrel felvett  $\gamma$ -spektruma

1/b) ábra.  $^{177m}\text{Lu}$  Ge/Li detektorral felvett  $\gamma$ -spektruma





2. ábra.  $^{110m}\text{Ag}$  szcintillációs (a) és félvezető detektorral (b) felvett  $\gamma$ -spektruma

Félvezető detektorral elérhető felbontás: 0,18 keV 6,4 keV-s, 0,75 keV 100 keV és 1,75 keV 1 MeV-s gamma-energiákra — ugyanakkor hatásfokuk 4—6 nagyságrenddel nagyobb, mint a mágneses, illetve kristály-diffrakciós spektrométereké.

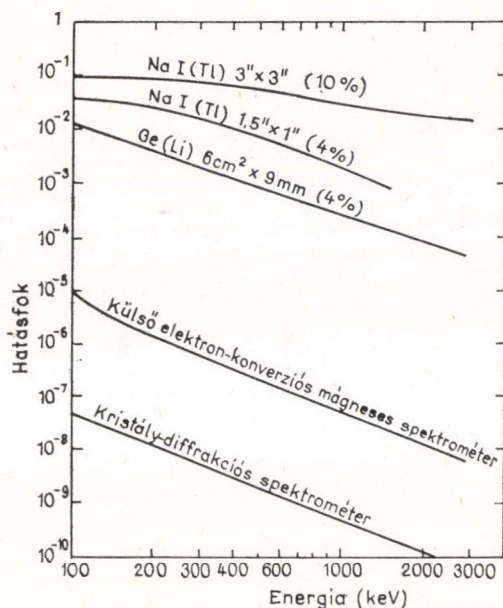
Az első gamma-spektrometriai mérést Si/Li detektorral végezték, mellyel gyakorlatilag a 100 keV-ig terjedő tartomány fedhető le.

A Ge/Li gamma-spektrometriai detektorok kifejlesztése a 0,2 cm<sup>3</sup> érzékeny térfogattól a 100 cm<sup>3</sup> térfogattig — planár, illetve koaxiális konstrukciós kivitelben — biztosította azt az információ-átalakító eszközt a magfizikusok számára, amellyel lehetőség nyílik az atom szerkezetének további megismerésére.

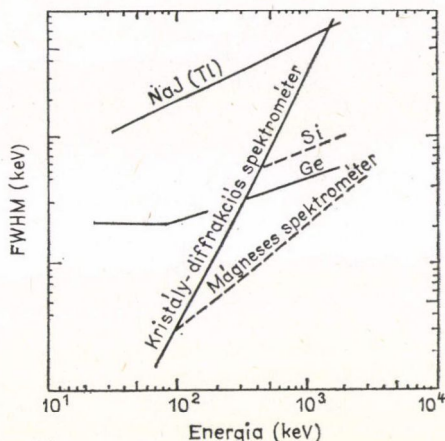
Mivel a félvezető detektor a gáz ionizációs kamra szilárdtest analógja, ezért a szilárdtest ionizációs kamra modelljén keresztül célszerű megvizsgálni a Ge/Li detektorok gamma-spektrometriai tulajdonságát meghatározó és befolyásoló tényezőket.

## 1.2. Gamma kvantumok kölcsönhatása szilárdtesttel

A magsugárzás detektálására és energiájának mérésére szolgáló módszerek vég eredményben a töltött részecskék hatásától függenek még akkor is, ha a sugárzás elektromágneses jellegű. A konverziós folyamat — mellyel töltött részecskék jönnek létre gamma-sugárzásnak anyaggal történő kölcsönhatásakor — döntően befolyásolja



1.3. ábra. Néhány  $\gamma$ -spektrométer gyakorlati hatásfokának összehasonlítása



1.4. ábra. Különböző spektrométerek felbontása a  $\gamma$ -energia függvényében

az energia meghatározás alapvető paramétereit (linearitás, felbontóképesség), ezért hatását minden esetben figyelembe kell venni az eredmények interpretálásánál.

Az anyagon áthaladó, s a szilárdtesttel kölcsönható gamma-sugárzás intenzitásának exponenciális csökkenése a  $\sigma$  abszorpciós koefficienssel jellemezhető.  $\sigma$ -értékét meghatározó 3 alpfolyamat:

- fotoelektromos effektus: a bejövő sugárzás által ionizált külső héj elektronjaiból áll: ( $\Phi_f$ ),
- fotonok Compton-szóródása a külső héj elektronjain: e folyamatban a héj-elektronok alapjában véve szabadoknak tekinthetők — az elektronoknak történő energiaátadás, a gamma-sugárzás  $h\nu$  kezdeti energiájának és szóródási szögének függvénye ( $\Phi_C$ ),
- elektron-pozitron pár keltés, mely a mag erőterében jön létre ( $\Phi_p$ ).

A fenti hatások összességésképpen:

$$\sigma = \Phi_f + \Phi_C + \Phi_p \quad (1.1)$$

Gamma-sugárzásnak szilárdtest ionizációs kamrával történő energia-mérésénél, az említett három folyamat határozza meg a mérés feltételeit, paramétereit, ezért szükséges ezen folyamatok rövid áttekintése: az összetevő hatáskeresztmetszetek anyagi állandókkal való kapcsolatainak megkeresése.



## Fotoeffektus

K abszorpciós él feletti energiáknál a fotoeffektus kapcsán elnyelődő foton egész  $h\nu$  energiáját az atomnak adja át: ennek eredményeképpen  $h\nu - E_K$  kinetikus energiával elektron lép ki ( $E_K$  az elektron kötési energiája).

Nem relativisztikus energia tartományban ( $h\nu \ll mc^2$ ) a K-héjra vonatkoztatott fotoelektromos hatáskeresztmetszet:

$$\Phi_{f,K} = \frac{4\sqrt{2}Z^5\Phi_0}{137^4} \left[ \frac{mc^2}{h\nu} \right]^{7/2} \quad (1.2)$$

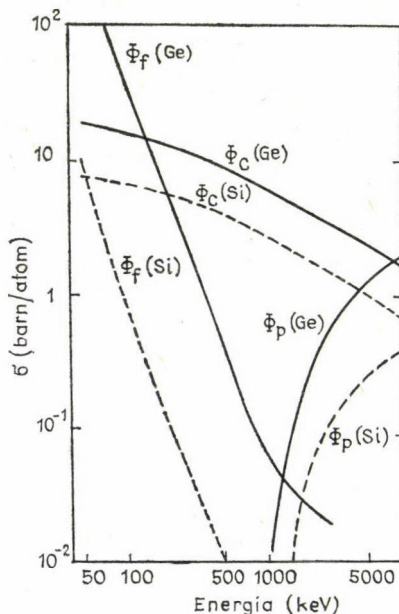
ahol  $\Phi_0$  a Thomson szórás, a szabad elektronokon történő szóródás hatáskeresztmetszete; értéke  $6651 \cdot 10^{-25} \text{ cm}^2$ .

Meg kell jegyezni, hogy a K héjhoz tartozó elektronok kötési energiájának nagyságrendjébe eső energiák esetén  $\Phi_{f,K}$  értéke jelentősen lecsökken, ugyanakkor a  $h\nu \gg mc^2$  gamma-energiáknál a relativisztikus effektus jelentőssé válik, így a mag Coulomb terének a kilépő elektronokra való hatását is figyelembe vevő összefüggésből:

$$\Phi_{f,K} = \frac{3}{2} \frac{Z^5 \Phi_0 mc^2}{137^4 h\nu} \exp[-\pi\alpha + 2\alpha^2(1 - \ln\alpha)] \quad (1.3)$$

— mely elsősorban a nehéz elemek esetén jelentős — látható, hogy  $\Phi_{f,K}$   $\nu$ -függése

sokkal kisebb mértékű  $\left(\alpha = \frac{Z}{137}\right)$ .



1.5. ábra. Fotoelektromos, Compton és párképzés hatáskeresztmetszetének változása az energia függvényében

A fotoelektromos kölcsönhatás elsősorban a K-héj kötött elektronjaival következik be, de kis energiájú fotonok és nagy rendszámú anyagok esetén a további héjakkal is jelentős lehet a kölcsönhatás. A fotoelektromos hatáskeresztmetszet meghatározásánál figyelembe kell venni az L, M... héjak abszorpciójából származó járulékat is.

A teljes fotoelektromos hatáskeresztmetszet meghatározására White [6] végzett számításokat; nehéz elemek esetében a  $\Phi_f/\Phi_K \sim 1,5$  C-nél nehezebb elemekre  $\Phi_f$  értéke  $\nu^{7/2}$ -nek megfelelően csökken, ugyanakkor pl. Pb esetében  $\Phi_f \nu^{-1}$ -el arányos.

White számításai figyelembe veszik az L, M héjak hatását is, amely kis energiáknál a fotoelektromos effektus egyetlen járuléka lesz a K-él alatt.

Így Ge esetében ez a törés a  $\Phi_f$  görbében 9,78 keV-nél lesz. Ennek megfelelően 10 keV alatti tartományban Ge alapanyagú detektor gyakorlati felhasználása nem célszerű, ezen energia-intervallum átfedése, kü-

lönösképpen fluoreszcenciás analízisnél csak Si alapanyagból készülő detektorral valósítható meg.

Összegezőként megállapítható, hogy egyrészt a fotoelektromos effektus hatáskeresztmetszete növekvő rendszámmal rohamosan nő, amely rámutat a Ge előnyére félvezető nukleáris detektorok készítésénél. Másrészt, ha a foton energiája meghaladja a K—héjon levő elektron kötési-energia értékét ( $E_K$ -t), úgy a  $\Phi_i$  értéke rohamosan csökken. Az 1.5 ábrán látható, hogy Si esetén 100—200 keV felett, Ge esetén 600—700 keV felett a fotoelektromos effektus hatáskeresztmetszete kisebb, mint  $10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ .

### Compton-szóródás

Elegendően nagy gamma-energiák esetén az elsődleges  $\gamma$ -fotonok a szabadnak tekinthető elektronokon szóródnak. Az energia és impulzuszórántum megmaradási elvének figyelembevételével a szóródó gamma-kvantum energiája:

$$h\nu = \frac{h\nu_0}{1 + (h\nu_0/mc^2)(1 - \cos \Theta)}, \quad (1.4)$$

ahol  $h\nu_0$  — a beeső gamma-kvantum energiája

$\Theta$  — a szóródó  $\gamma$ -kvantum szöge.

A szórt gamma-foton energiája növekvő  $\Theta$ -val csökken. Minimális értékét  $\Theta = 180^\circ$ -nál éri el:

$$h\nu_{\min} = \frac{h\nu_0}{1 + (2h\nu_0/mc^2)}. \quad (1.5)$$

A kilépő elektron kinetikus energiája:

$$T = h(\nu_0 - \nu) = \frac{2mc^2(h\nu_0)^2 \cos^2 \varphi}{(h\nu_0 + mc^2)^2 - (h\nu_0)^2 \cos^2 \varphi}, \quad (1.6)$$

ahol  $\varphi$  — a kilépő elektron és a beeső  $\gamma$ -kvantum által bezárt szög.

A kilökött elektron lehetséges maximális szöge  $\varphi = 90^\circ$ ; ekkor az elektron energiája  $T=0$ , míg a szóródott gamma-sugárzás kezdeti energiájával ( $h\nu = h\nu_0$ ) folytatja útját tovább.

A Compton-szórásnál keletkezett elektronok energia szerinti eloszlásából kitűnik, hogy az elsődleges fotonokénál mintegy 0,2 MeV-val kisebb a meglökött elektronok maximális energiája.

A Compton-szórásra vonatkozó differenciális hatáskeresztmetszet az energia függvényében a Klein-Nishina összefüggés alapján:

$$\frac{d\Phi_C}{dE} = \frac{\pi q^4}{m_0 c^2 (h\nu - E)^2} \left[ 2 \left( \frac{h\nu - E}{h\nu} \right)^2 + \left( \frac{Em_0 c^2}{h^2 \nu^2} \right)^2 + \frac{(h\nu - E)(E - 2m_0 c^2)E}{h^3 \nu^3} \right]. \quad (1.7)$$

Ez a hatáskeresztmetszet az energia növekedésével csökken, de ez a csökkenés sokkal lassúbb, mint a fotoelektromos kölcsönhatás esetében.



Minthogy Compton-szórásnál az elektronok egymástól függetlenül vesznek részt a folyamatban, így a kölcsönhatás nagysága az anyag elektronkoncentrációjával ( $NZ$ )-vel lesz arányos:

$$\Phi_C \sim \frac{NZ}{h\nu} \ln \left[ \frac{2h\nu}{mc^2} + \frac{1}{2} \right]. \quad (1.8)$$

Si és Ge esetén 0,05—12 MeV, illetve 0,2—8 MeV között a Compton-effektus hatása dominál, mint azt az 1.5 ábra is mutatja.

### *Párkeltés*

Ahhoz, hogy párkeltési folyamatban a gamma-kvantum elnyelődése során pozitron-elektron pár jöjjön létre a beeső foton energiája meg kell hogy haladja az elektron és pozitron pár nyugalmi energiáját: 1,02 MeV-t. Az energia és impulzus megmaradás elve értelmében ez a materializációs folyamat anyagi tömeg közelében megy végbe (pl.: elektron vagy mag). Ez az általunk vizsgált gyakorlati energia-tartományban a mag, illetve annak Coulomb tere. A mag szerepe abban áll, hogy az energia és impulzus megmaradás törvénye értelmében magára veszi a foton impulzusmomentumának nagy részét. A mag töltésének növekedésével a párkeltési folyamat valószínűsége  $Z^2$ -el arányosan megnő.

A foton energiája és a pozitron — elektron pár nyugalmi tömegének megfelelő energia közötti különbség a keltett részecskék kinetikus energiájává alakul át:

$$E_{\text{kin}} = h\nu - 2mc^2 = h\nu - 1,02 \text{ MeV}. \quad (1.9)$$

Párképzésre vonatkozó abszorpciós-koefficiens a küszöb energia ( $h\nu < 1,02 \text{ MeV}$ ) alatt zérus. Kb. 10 MeV-s energiáig lineáris növekedést mutat:  $\Phi/Z^2$  — független a rendszámtól.

$$\Phi_p \sim NZ^2(E\gamma - 2mc^2), \quad (1.10)$$

míg nagyobb energiákon ez a függés logaritmikussá válik az árnyékolóeffektus következtében (20 MeV felett).

$$\Phi_p \sim NZ^2 \ln E\gamma. \quad (1.11)$$

Meg kell jegyezni, ha a párképzés elektron terében megy végbe, úgy az elektron visszalökődik, s triplet keletkezik: pozitron és két elektron.

Párképzés esetében is — Compton-szóráshoz hasonlóan — a foton energiájának csak egy része nyelődik el ténylegesen. A párképzési folyamat annihilációs folyamattal jár együtt, mikor is a nyugalmi tömegnek megfelelő energia a megsemmisülési sugárzás két kvantumának adódik át.

### *Következtetés*

Végeredményben a parciális koefficiensek összegeként adódó teljes abszorpciós koefficiens egy minimumon halad át, melyhez tartozó energia, a rendszám növekedésével növekszik.



Félvezető detektorok céljára leggyakrabban felhasznált Si és Ge esetén a  $\sigma$ -abszorpciós tényező energiafüggését gamma-sugárzás esetén az 1.5 ábra mutatja. Látható, hogy a fotoelektromos kölcsönhatás 60 keV-ig, illetve 160 keV-ig, míg e felett a Compton-szórás dominál. Ezen anyagokra a párkeltés hatáskeresztmetszete csak 6, illetve 3 MeV felett lesz jelentősebb. Megfigyelhető, hogy germániumban a Compton elnyelődés részesedése a teljes abszorpciós koeficiensben kisebb, mint Si esetén.

A mérendő gamma-kvantum energiájának nagysága határozza meg elsődlegesen a detektor alapanyagának rendszámát, geometriáját; érzékeny térfogat konfigurációját. A tárgyalt kölcsönhatásokból gamma-energia meghatározására a fotoelektromos kölcsönhatás jön elsősorban számításba — ennek megfelelően az anyag kiválasztásánál a nagy fotoelektromos hatáskeresztmetszet elsődleges szempont. Ezek figyelembevételével jelenleg széleskörű felhasználásra egyenlőre csak a germánium alkalmas.

### 1.3. Szilárdtest ionizációs kamrával végzett energiamérés korlátozó tényezői

#### *Bevezetés*

A szilárdtesttel kölcsönható elektromágneses sugárzás energiájának meghatározása a keltett töltött részecskék ionizációja kapcsán válik lehetővé. Bár a töltött részecskék és az anyag elektronjai közötti energia-átadás nagyban különbözik — azonban az elemi töltésként abszorbeált energia mennyiség az ionizációs track mentén jól meghatározott értéket képvisel. Ennek következtében a fotoelektromos kölcsönhatás és párképzés során létrehozott töltött részecskék teljes egészében elnyelődnek a szilárdtest ionizációs kamra érzékeny térfogatában, s így a keltett ionizáció a töltött részecske energiájának közvetlen mértéke.

Félvezető detektor készítéséhez alkalmas anyag kiválasztásánál alapvető követelmény, hogy az ionizációval keltett pozitív és negatív szabad töltések mérhetőek legyenek. A sugárzás által keltett szabad töltések direkt begyűjtését és külső áramkörben történő mérését, csak a gázionizációs és szilárdtest ionizációs kamrák töltésgyűjtő tulajdonsága teszi lehetővé s ezáltal alkalmassá spektrometrikai felhasználásra. Detektor anyagában keltett ionizáció alapvetően határozza meg az előállítás korlátait.

#### *1.3.1. Töltés-keltési folyamat*

A gamma-kvantumok elsődleges kölcsönhatása; elektronok kiváltása, melyek pályájuk mentén lyuk-elektron párokat hoznak létre. A sugárzás energiája egyrészt a szilárdtest valencia sávjából a vezetési sávba történő gerjesztésre fordítódik, — melyet a detektor szempontjából hasznosnak tekinthetünk — másrészt nem hasznosítható rácsrezgésekre használódik el. A detektor alapanyagát jellemzi ezek megoszlási aránya, s a folyamat statisztikus fluktuációja.

Mikor a sugárzás-detektort spektrométerként használjuk, szokásos egy  $w$  mennyiség definiálása — mely a sugárzás által a detektálható elemi esemény létrehozására fordított közepes energia: ez gázszámlálók esetén az ion-pár, illetve fotoelektron, szcintillációs detektor — fotomultiplier rendszer esetén. Ilyen mennyiség félvezető de-



tektorok esetén is definiálható, s képviseli a sugárzás által a lyuk-elektron pár képzésére fordított közepes energiát.

A kísérleti mérések eredményei jelzik, hogy a  $w$  független a sugárzás energiájától, s lassan változik a félvezető hőmérsékletével. Nem egyértelmű  $w$  függetlensége különböző sugárzás fajtákra az egymásnak ellentmondó eredmények közlése miatt.

Mithogy a nukleáris sugárzás energiájának félvezető detektor belsejében történő részletes disszipálási folyamata nem teljesen ismert, így Si és Ge esetében a  $w$  elméleti interpretálása csak egy feltételezett ionizációs modellen keresztül lehetséges. A mai napig csak Shockley [8] és Klein [9] dolgozott ki ilyen elméletet. Van Roosbroeck [10] által javasolt modell analóg Shockley-ével.

Shockley által javasolt ionizációs mechanizmus — mely a gázok ionizációs folyamatával analóg módon írható le — nagy energiájú lyuk-elektron-párokat hoz létre, melyek ismételt párokat keltenek. Az energia-egyensúly a következő három típusú energia átadáson keresztül jön létre:

- lyuk-elektron pár-képzés, mely  $E_i$  mennyiségű energiát abszorbeál;
- minden generált pár esetén átlagban  $rE_R$  energia adódik át a rácsoknak fononok formájában, ha a töltéshordozók kinetikus energiája meghaladja  $E_i$  értéket;
- az ionizációs folyamat végén minden töltéshordozó kinetikus energiája kisebb lesz, mint  $E_i$ , s így tovább már nem képes ionizálni. Ezen végső energiának a közepes értéke  $E_f$ , mely rácsrezgésre fordítódik.

Ebből következik, hogy egy lyuk-elektron pár képzésnél felhasznált energia közepes értéke:

$$w = E_i + rE_R + 2E_f \quad (1.12)$$

$E_R$  a rács Raman rezgésének megfelelő kvantum energiát képviseli. A modellnek megfelelően,  $E_i$  kinetikus energiánál nagyobb töltéshordozók csak ezen frekvenciájú fononokon szóródnak.  $E_R$  neutron diffrakciós mérésekből származtatott numerikus értéke;  $E_R = 0,063 \pm 0,003$  Si esetére és  $E_R = 0,037$  eV, Ge esetére. Az ionizáció és Raman-szórás közepes úthosszáinak viszonya  $r = L_i/L_R$  — az egy ionizációra eső közepes fononszámként vehető figyelembe. Amennyiben a töltéshordozó energiája  $E > E_i$ , úgy ionizálási valószínűsége zérustól különböző lesz, vagyis  $E_i$  ionizációs küszöbként vehető figyelembe.

$E_f$ -et illetően Shockley feltételezi, hogy a végtermékként keletkezett töltéshordozók  $E_i$ -nél kisebb energiával a Brillouin zónán belül bárhol egyforma valószínűséggel találhatók. Ezért a parabolikus energiafelületekre az eredmény:

$$E_f = 0,6 E_i \quad (1.13)$$

és

$$w = 2,2 E_i + rE_R \quad (1.14)$$

$w$  kiszámításához  $E_i$  és  $r$  ismerete szükséges. Ezek az értékek Vavilov [11] által Si-re és Ge-re végzett kvantumhatásfok kísérletek megfelelő interpretálásából adódnak.

A modell igen jól alátámasztja a kísérletileg kapott adatot Si esetén, de eléggé eltérő értéket eredményez Ge-ra.

Shockley elmélete szerint a lyuk-elektron pár képzésre fordított közepes energia a sugárzás fajtájától független, s csak a félvezető anyagokra jellemző.

Különböző szerzők az ionizációs mechanizmusra számos elméletet dolgoztak ki.



Így Klein Shockleytól eltérően abból indul ki, hogy a lyuk-elektron pár képződést plazmon köré csoportosítja, amely energiáját az annihiláció után a lyuk-elektron pároknak adja át. Antončík és Hodkinson [12, 13] az  $E_i$  fizikai értelmének megfogalmazásával próbálkoztak.

Összefoglalásként megállapítható, hogy a létező elméletek közül egyik sem adja meg az ionizációs folyamat tökéletes leírását, s nem ad pontos adatokat a lyuk-elektron pár képzésre fordított energiára, a különböző egyszerűsítő feltételezések következtében. Azonban minden modellből kitűnik, hogy lyuk-elektron pár képzésre fordított  $w$  energia közelítőleg a tiltott sáv háromszorosa lesz.

### 1.3.2. Fano faktor

Gyors részecske áthaladásakor a detektorban elnyelődött  $E_0$  energia  $N = E_0/w$  számú elemi töltést hoz létre, amely félvezető detektorban nagyobb, mint más detektor típusban. Előnye szembevetendő: egyrészt az így kapott detektor jel nagyságrenddel nagyobb, pl. az ionizációs kamra jelenél, másrészt a generált töltések számában mutatókozó statisztikus szórás kisebb. Ha a beeső sugárzás teljes energiája nyelődik el a detektor érzékeny térfogatában, akkor is létezik az energia-felbontásnak egy felső határa, mely az ionizáló sugárzás által keltett ion-párok számában előálló fluktuáció következménye.

Fano volt az első, aki tárgyalta ezt a problémát gáz-ionizáció esetében [14]. Azt találta, hogy adott energiájú sugárzás által keltett ionpárok szórásnégyzete az ionpárok közepes számának  $F$ -szerese. A Fano-faktor ( $F$ ) 1-nél kisebb szám, melyet az abszorbeáló közeg és az ionizációs folyamat tulajdonsága határoz meg.

Ennek megfelelően félvezető detektoroknál a mérendő monokromatikus sugárzás vonalkiszélesedése az ionizáció fluktuációja miatt:

$$\delta_g^2 = (2,35)^2 (N - N)^2 = (2,35)^2 FN, \quad (1.16)$$

ahol  $N$  az elnyelődött  $\gamma$ -kvantum által generált ion-párok száma,  $(N - N)^2$  az ionpárok szórásnégyzete,  $F$  a Fano-faktor.

Mint ahogy a sugárzás által keltett ion-párok  $w$  képzési energiája ismert, így felírható:

$$\delta_g^2 = (2,35)^2 w F E_\gamma \quad (1.17)$$

ahol  $E_\gamma$  az elnyelt  $\gamma$ -kvantum energiája.

Ennek megfelelően  $\delta_g^2$  meghatározása a Fano faktor meghatározásához vezet.

Mint ahogy az ionizációs mechanizmus félvezetőkben részleteiben nem eléggé tanulmányozott, ezért a Fano faktor meghatározása fenomenológiai jellegű, s kiszámítása az ionizációs modellre elfogadott néhány paraméter megfelelő megválasztásával végezhető el.

Alkhazov és társai [15, 16] által közölt, számított adatok jó egyezésben vannak a kísérleti eredményekkel [17, 18]. A szerzők Fano által javasolt közelítést alkalmazták a Shockley-féle ionizációs modellre. Az így kapott eredmény:

$$F = \left( \frac{kE_R}{w} \right)^2 + 0,14 \left( \frac{E_i}{w} \right)^2 \quad (1.18)$$



ahol  $k$  a fonon, illetve lyuk-elektron pár keltés valószínűségének hányadosa;  $E_R$ , illetve  $E_i$  az 1.3.1. jelöléseivel egyezően.

Figyelembe véve a p-n átmenetben végbemenő másodlagos ionizáció sebességére vonatkozó adatokat, Klein [19] feltételezte, hogy  $E_i = \frac{3}{2} E_t$ , ahol  $E_t$  a tiltott sáv szélessége. Emellett kimutatta, hogy a  $w$  és  $E_t$  közötti kapcsolatra érvényes a következő összefüggés:

$$w = \frac{14}{5} E_t + k E_R, \quad (1.19)$$

ami kissé eltér a Shockley által kapott eredménytől.

A Klein-féle összefüggés Ge esetén jó egyezésben van az ion-pár képzésre fordított energia hőfüggésével [20], ugyanakkor  $k E_R$  nem függ a hőmérséklettől. Ezenkívül a fenti egyenlet kielégítően írja le a  $w - E_t$  kapcsolatot különböző félvezetőkre a  $0,5 \text{ eV} \leq d E_R \leq 1,5 \text{ eV}$  energia tartományban.

A Ge-ra 77 K-on kapott kísérleti eredmények ( $E_t = 0,735 \text{ eV}$ ;  $w = 2,975 \text{ eV}$ ) és az (1.19) összefüggés felhasználásával  $k E_R$  értéke  $0,927 \text{ eV}$ . Ezt az (1.18) egyenletbe helyettesítve,  $F = 0,116$  eredményt kapjuk, ami igen jó egyezésben van az irodalomban közölt [18] mérés eredményével ( $F = 0,129$ ).

Ezek után kiszámítható az  $E_\gamma$  energiának megfelelő impulzus amplitúdó — lyuk-elektronpár generáció fluktuációjából adódó — szórása:

$$\delta_g = 2,35 \sqrt{0,347 E_\gamma}. \quad (1.20)$$

A fentiek alapján germánium alapanyagú detektor felbontóképességének elvi határa  $E_\gamma = 1 \text{ MeV}$  esetén  $1,38 \text{ keV}$  adódik. A gyakorlatban azonban ilyen felbontóképességű germánium detektorokat csak ritkán sikerül előállítani, ami ugyancsak aláátaszta a töltésvesztés fluktuációjának meghatározó szerepét.

#### 1.4. Nagytérfogató Ge/Li detektorok előállításának elvi alapjai

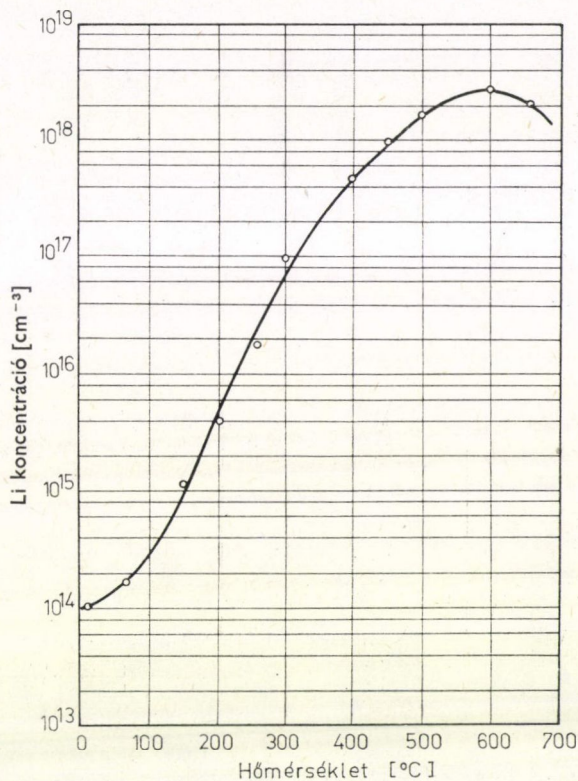
##### 1.4.1. n-i-p struktúra létrehozása germániumban

A lítium diffúziós koefficiensének Ge-ban és Si-ban, ion-drifttel történő mérése e módszernek a különböző rácshibákkal szembeni rendkívül nagy érzékenységét bizonyította. Egyszeresen ionizált, elektromosan aktív Li-donor ( $0,098 \text{ eV}$  a vezetési sáv aljától) germániumban a legnagyobb mozgékonyaságú ion. Ez a mozgékonyaság egészen szobahőmérsékletig megmarad, mikorra már az összes többi ismert hibahely gyakorlatilag rögzítődik.

Ge—Li szilárd oldatának segítségével sikerült először demonstrálni a tömeghatás törvényének alkalmazását, s következőképpen értelmezni a félvezetők rácshibáinak elektromos tulajdonságait.

A lítium oldékonyaságát, ötvözetlen,  $10^{13} \text{ cm}^{-3}$  szennyezés koncentrációjú kompenzálatlan germániumban a Hall effektus méréseivel vizsgálták [21]. A mérések azt mutatták, hogy az oldékonyaság változása a hőmérséklet függvényében — 1.6. ábra — retrográd jellegű: az oldékonyaság maximumát  $610^\circ \text{C}$  hőmérsékleten éri el, s ezt követően csökkenő tendenciát mutat. A lítium egyensúlyi állapotú oldékonyasága ötvözetlen

germániumban, 25 °C hőmérsékleten  $(6,6-10) \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ , de akceptorok jelenléte az ionpárok képzése révén elősegíti ennek az értéknek a növekedését. Az ionpárképzés jelensége, valamint a diffundált lítium-ionok túltelített állapotban való létezésének lehetősége Pell [22] számára lehetővé tették, hogy kidolgozza az effektív diffúziós-koefficiens mérésére alkalmas, a félvezetők rácsszerkezetének hibáit is figyelembe vevő módszert.



1.6. ábra. Lítium-oldékonyság hőmérséklet függése nem dopolt germániumban

Lítium-ionoknak a diffúziós rétegből (n-tartomány) az akceptort tartalmazó félvezető térfogatba (p-tartomány) történő driftje az n-p-átmenet megtartása mellett elektromosan inaktív donor-akceptor páros komplexumokat tartalmazó tértöltési tartomány (i-tartomány) kialakulását eredményezi. Ily módon n-i-p struktúra jön létre, amelyben töltéshordozók csak termikus generáció, illetve a kompenzált szennyezők generációja útján keletkezhetnek [23]. A kompenzált, tértöltési tartomány szilárdtest ionizációs kamraként történő felhasználása igen perspektivikusnak bizonyult, különösképpen  $\gamma$ -kvantumok energia mérésére.

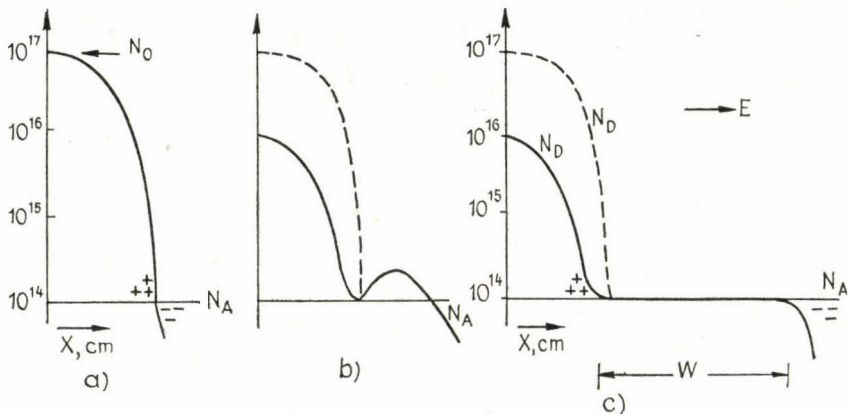
Az első n-i-p szerkezetű, szilícium alapanyagból készült detektorok [24] igen jó feloldóképességgel rendelkeztek, széles energia-intervallum átfogására voltak alkalmasak. Hamarosán kiderült azonban a szilícium bázisú gamma-detektorok szélesebb



körü alkalmazását gátló körülmény. Mint az 1.2 pontban részletesen tárgyaltuk a fotoelektromos abszorpció és a párképzés hatáskeresztmetszete  $Z^3$ , illetve  $Z^2$  értékekkel arányos, így könnyen belátható, hogy a  $\gamma$ -kvantumok energiájának növekedésével a hatásfok gyorsan csökken szilícium esetében, míg germánium alkalmazásával a  $\gamma$ -kvantumok mérésére vonatkozó energia-határ kitolódik. Ezzel rendkívüli lehetőség nyílt meg az eddig kevésbé vizsgált atommag-folyamatok tanulmányozására.

#### 1.4.2. Lítium diffúziója és driftje germániumban

Lítium diffúziója germániumba a szokásos állandó forrásból valósítható meg [25]. A donor koncentráció a forrásban  $N_0$ , a kristály térfogatában  $N_D$ . A diffúziós folyamat megkezdése előtt a kristályban csak akceptorok vannak, koncentrációjuk  $N_A$ . Az  $N_D \gg N_A$  feltétel mindaddig igaz marad, amíg a  $c$  pontban ki nem alakul az n-p átmenet — 1.7.a ábra).



1.7. ábra. Li eloszlása n-i-p szerkezetű detektorban: a) diffúziót követően, b) túlkompenzáció esetén, c)  $W$  mélységre történt driftelés után

A lítium eloszlását,  $c$  mélyséig, a valós kristályszerkezettel való kölcsönhatás figyelembevétele nélkül, a Krampf függvény írja le:

$$N_D = N_0 \operatorname{erfc}[x/2(D \cdot t)^{1/2}] \quad (1.21)$$

ahol  $D$  a diffúziós állandó,  $T$  hőmérséklet esetén,  $t$  a diffúzió időtartama [26].

A szobahőmérsékletre való gyors lehűtés a lítium-ionok egy része a diffúziós rétegben az egyensúlyi állapotból túltelített állapotba kerül. A túltelített oldat idővel lebomlik és ezáltal az egész lítium rögzített állapotba kerül. Következésképpen a drift időtartama a túltelített szilárd oldat lebomlási idejével lesz összefüggésben.

Az n-p átmenetre kapcsolt  $U_d$  zárófeszültség  $E$  elektromos teret hoz létre az átmenet közelében, mely a lítium-ionok p-tartományba történő driftjét eredményezi

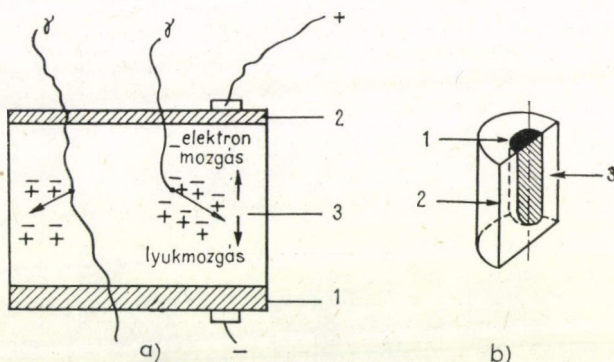
[27]. Az  $E$  térerősség nagy értéke miatt a driftelődő lítium-ionok árama jelentősen meghaladja ugyanezen ionok diffúziós áramát, vagyis:

$$E \cdot \mu \cdot N_D \gg DVN_D \quad (1.22)$$

ahol  $\mu$  a lítium-ionok mozgékonyasága.

Az (1.22) kifejezésből azt a következtetést vonhatnánk le, hogy  $x > c$  esetén  $N_D$  értéke növekszik,  $x < c$  esetén pedig csökken.  $N_D$  értéke azonban  $x < c$  esetén  $N_A$ -nál kisebb nem lehet, mivel ezen tartományon belüli akceptor felesleg — 1.7.b ábra —, a töltés értékét úgy változtatja meg, hogy a lítiumion felesleg oldalán a térerő növekszik, a lítiumion hiány oldalon pedig csökken. Az ion felesleg az ion szegény tér felé áramlik mindaddig, amíg ez az ionhiány ténylegesen fennáll. Hasonló okok miatt  $x > c$  esetén a lítiumionok koncentrációja nem lépheti túl az  $N_A$  értéket. Következésképpen  $N_D$  értéke  $N_A$ -hoz közelít és kialakulhat a tökéletesen kompenzált tértöltéstartomány, az 1.7.c ábrán látható  $i$ -tartomány.

Az 1.8. ábrán az  $n$ - $i$ - $p$  szerkezetű detektor két ismert kivitelének elvi ábrázolása — a planár és a koaxiális konfiguráció — látható. A koaxiális detektor a planár kialakítású detektorral szemben nagyobb energiák esetén is igen jó felbontású és hatásfokú mérést tesz lehetővé.



1.8. ábra. Ge/Li detektor elvi vázlata planár (a) és koaxiális (b) konfiguráció esetén 1. p, 2. Li( $n^+$ ) 3.  $i$ -tartomány

A lítiumion driftmélysége konfigurációtól függetlenül általában nem haladja meg a 10–12 mm-t, ekkorra már a lítiumion forrás gyakorlatilag kimerül. A driftelési folyamat ilyen mélység eléréséig néhány hetet vesz igénybe.

Állandó elektromos tér feltételezésével a  $W$  intrinzik-tartomány növekedése a következő összefüggésből határozható meg:

$$\frac{dW}{dt} = \mu E = \frac{U_d}{W} \mu$$

ahonnan:

$$W^2 = 2\mu U_d t. \quad (1.23)$$

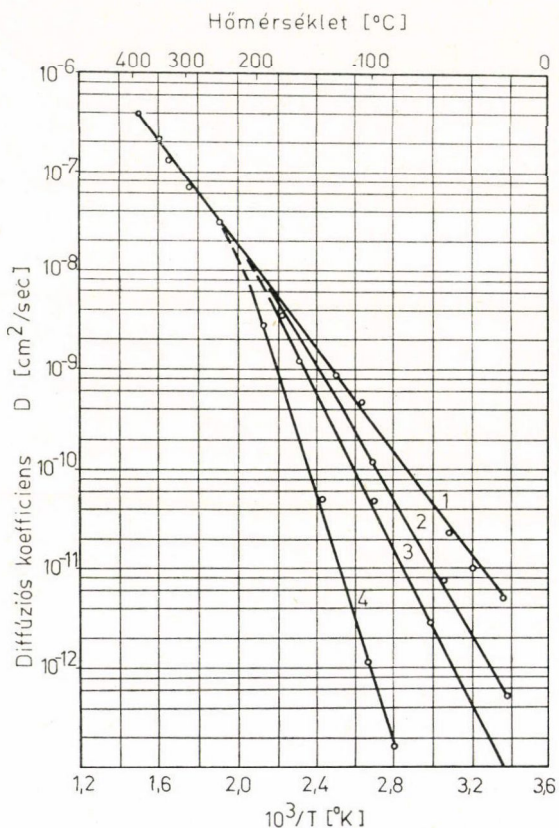
Az (1.23) alatti kifejezés azonban tartalmazza a  $\mu$  értékét is, mely függ bizonyos trapcentrumok koncentrációjától ( $N_X$ ), illetőleg azok természetétől. Ez a relatíve alacsony



nyabb hőmérsékleten (200 °C-tól kezdődően) szembetűnő, melyet jól szemléltet az 1.9. ábra. A lítium és a szennyezők közötti kölcsönhatást is figyelembe vevő  $D_{\text{eff}}$  diffúziós tényező az Einstein-féle összefüggésből határozható meg:

$$D_{\text{eff}} = \mu \frac{kT}{q}, \quad (1.24)$$

ahol  $q$  a lítiumion töltése,  $k$  a Boltzman-féle állandó.



1.9. ábra.  $\text{Li}^+$  diffúziós koeficiensének hőmérséklet függése tiszta germánium (1) illetve Ga (2) In (3) és Zn (4) szennyezővel dopolt Ge esetén

A drifelési folyamat befejezésére a lítiumion forrás (n-tartomány) teljes kimerülése következtében kerül sor: ezek után a lítium atomok eloszlási függvénye  $N_D$  új formát ölt (1.7.c ábra). Ez a függvény nemcsak a lítiumionok drift-hőmérsékletéhez tartozó statisztikus eloszlást, hanem a túltelített oldatból precipitált lítium atomokat is magában foglalja.

A felületegységre vonatkoztatott általános anyag egyensúly az alábbi módon írható fel:

$$\int_0^c N_D dx = \int_0^c N'_D dx + W N_A + W N_{X'}$$

ahonnan

$$W = \frac{1}{N_A + N_{X'}} \cdot \int_0^c (N_D - N'_D) dx.$$

A függvények különbségét integrálva az alábbi végeredményt kapjuk:

$$W = \frac{N_D - N'_D}{N_A + N_{X'}} \cdot \frac{c}{\sqrt{\pi}}. \quad (1.25)$$

Az (1.25) alatti kifejezést elemezve megkapjuk a  $W$  érték eléréséhez szükséges határfeltételeket:

$$N'_D \ll N_D \quad (1.26)$$

$$N_X \ll N_D \quad (1.27)$$

$$N_D \ll N_A. \quad (1.28)$$

A  $c$  diffúziós réteg vastagsága függ a diffúzió időtartamától és a diffúzió hőmérséklettől, s megfelelő pontossággal meghatározható az alábbi képlet segítségével:

$$c \cong 2 \sqrt{Dt}. \quad (1.29)$$

#### 1.4.3. Germánium—lítium rendszer

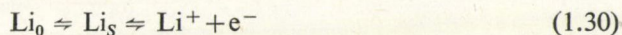
Lítium viselkedése germániumban sok szempontból kivételes tulajdonságokat mutat. A gyorsan diffundáló elemek — lítium, réz, nikkel, ezüst és vas — közül szilárd oldatban csak a lítium képes a rácsok közötti migrációra [26]. Ez a tulajdonság csak a hidrogénnel és a héliummal hasonlítható össze, melyek germániummal ugyancsak szilárd oldatot alkotnak és diffúziós sebességük is a lítiumével összemérhető [27]. Bizonyos határok között tehát úgy tekinthetjük, hogy a lítium germániumban fémes tulajdonságokkal rendelkező gázként viselkedik.

A lítium diffúziós együtthatóját germániumban széles hőmérséklettartományban vizsgálták; az eredmények jó összhangban vannak az elmélettel [25, 28]. Alacsony hőmérséklet esetén (200 K alatt) a diffúziós együttható értéke nagymértékben függ a különböző szennyezők jelenlététől [29], s a határok között változik (1.9. ábra).

600 °C hőmérsékleten a lítium a germániummal eutektikumot alkot; s a károsodott kristályrácsszerkezet megváltoztatja a diffúziós folyamatot. Ez a tény egyben behatárolja a diffúziós folyamat célszerű hőmérséklettartományát: a gyakorlatban ez 425–480 °C között mozog.

Lítium oldékonyságát germániumban több szerző [30, 31] vizsgálta: a kísérletek jó egyezést mutattak a szennyezők félvezetőkbéli oldékonyságát leíró Reiss-féle elektrolitikus modellel [32].

Lítium germánium rácsszerkezetébe történő beépülése a következő reakció alapján megy végbe:

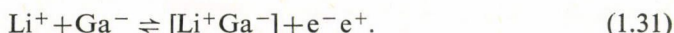




ahol  $Li_0$  és  $Li_s$  a külső és szilárd fázisokban levő nem ionizált atomok; illetve  $Li^+$  és  $e^-$  az ionizált oldott anyag és az elektron.

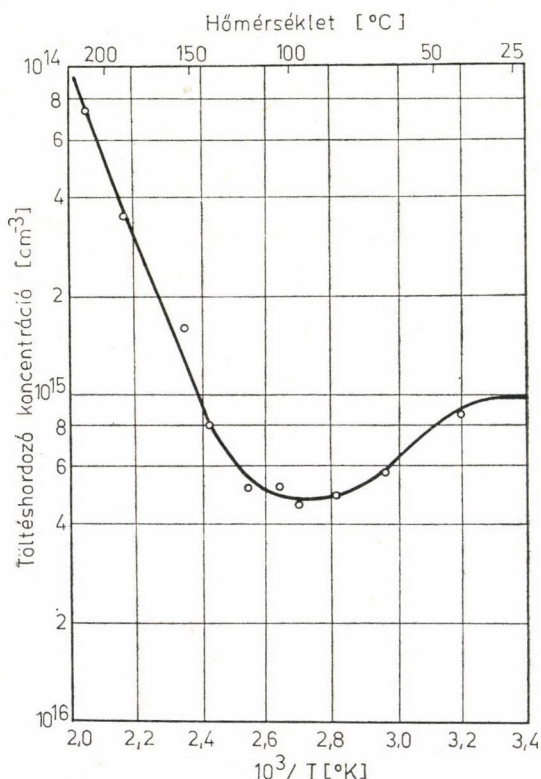
Fenti egyensúlyi egyenletből következik, hogy az elektronkoncentráció tömeghatás törvényének megfelelő növelése csökkenti az ionizációt, s következésképpen, a  $Li_0$  atomok oldékonyságát. Az elektronkoncentráció csökkenése viszont a  $Li_0$  atomok oldékonyságának növekedését eredményezi.

A Li oldékonyságot az elektronok hatásán kívül alapjaiban befolyásolja a különböző előjelű ionok párképzése [32]. Így például galliummal ötvözött germánium esetében az alábbi egyensúlyi egyenlet írható fel:



Az 1.6. ábrán a folytonos vonal a lyuk-elektron egyensúlyi állapot és az ionpár egyensúly figyelembevételével számított görbét mutatja, amely jó összhangban van a kísérleti eredményekkel.

Az 1.10. ábra a lítium oldékonyság hőmérsékletfüggését ábrázolja  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  galliummal ötvözött germánium esetén. A görbén látható minimumot az (1.30), illetve az (1.31) alatti reakcióknak megfelelően a Reiss-elmélet előrejelzi. Hasonló



1.10. ábra. Li-oldékonyság hőmérséklet függése germániumban  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  Ga-szennyezés esetén

jelenségek fizikai értelmezése a következőkben foglalható össze. Kezdetben, szoba-hőmérséklet körüli hőmérsékleten, a lítium oldékonysága kizárólag az ellentétes elő-jelű galliumionnal való párképzés útján valósul meg. A semleges párok keletkezése elsődlegesen az akceptor ionhányad, s következőképpen, a lítium oldékonyság csökkenését eredményezi. Az (1.31) típusú reakció disszociációfokának hőmérséklettel való növekedése azonban felszabaduló gallium lyukakat szállít, melyek kölcsönhatva az elektronokkal az (1.30) reakciót a jobb oldali irányba tolják el.

A nagy mélységbe történő Li iondriftelés megvalósítása telítésben levő  $N_D$  donor koncentráció hosszú idejű fenntartását igényli a diffúziós rétegben (1.7.a és 1.7.c ábra). Morin és Reiss (33), lítium szilárd oldatának lebomlási kinetikáját vizsgálva, az alábbi összefüggést kapta:

$$\ln \frac{N'_D}{N_D} = -\beta t^{3/2}, \quad (1.32)$$

ahol  $N'_D$  a  $t$  idő elteltével oldatban maradt koncentráció,  $N_D$  az egyensúlyi oldékonyság, telítési hőmérsékleten;  $\beta$  állandó, mely a precipitációs centrumok koncentrációjától, a diffúziós koefficiensától és néhány egyéb, e centrumok geometriájával kapcsolatos tényezőtől függ.

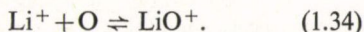
További vizsgálatok igazolták, a  $\beta$  állandó és a precipitációs centrumok koncentrációja közötti összefüggés összetett jellegű.

Precipitációs centrumok a vakanciák által történő Li-ion befogással képződnek:



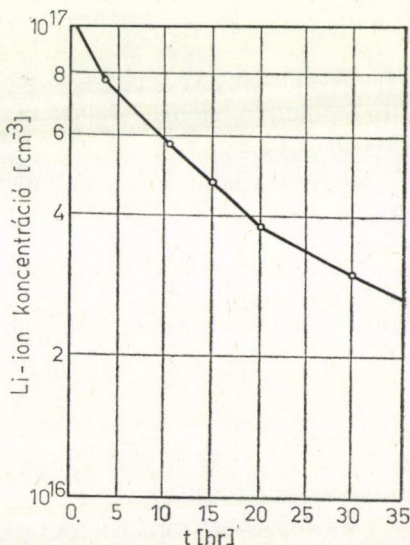
Ezt a mechanizmust germániummal végzett kísérletek támasztották alá; a nagy számú vakanciát elektronbesugárással és plasztikus deformációval hozták létre [33].

Az 1.11. ábra szemlélteti a germániumban oldott lítiumionok precipitációját. Két töréspont látható, melyek kicsapódási mechanizmusban végbemenő változásnak felelnek meg. Pell [22] szilíciumban oldott lítium analóg lebomlását vizsgálva, megállapította, hogy a lítiumion először atomi oxigénné válik ki, a következő reakcióegyenletnek megfelelően:



A reakció megfordítható:  $\text{LiO}^+$  elbomlik, ha  $\text{Li}^+$ -t eltávolítjuk az adott hőmérsékletre tartozó egyensúlyi állapot eléréséig végzett precipitációval. Oxigénnek, mint katalizátor-nak Ge—Li szilárd oldat lebomlására való hatását ugyancsak számos szerző igazolta [33, 34], a jelenség minden vonatkozásban szilíciumra is értelmezhető.

Oxigén és réz kölcsönhatásának kinetika-i vizsgálatai germániumban [26] igazolták az oxigén, illetve szennyezők közötti kölcsön-



1.11. ábra. Germániumban oldott lítium precipitációja



hatás mechanizmusát. Beigazolódott, hogy germániumban jelenlevő, az akceptorokkal és az oldott lítiummal összemérhető koncentrációban jelenlevő oxigén, a driftelés esetén károsan befolyásolja az *i*-tartomány növekedését.

#### 1.4.4. Germánium—oxigén rendszer

Germániumba beépült oxigén a szilárd oldatot alkotó szennyezők közé tartozik. A hidrogénhez, lítiumhoz hasonlóan az oxigén is alacsony oldási hővel jellemezhető (27,6 kcal) a vakancia kialakításához szükséges hőmennyiséghez (46,7 kcal) viszonyítva. Ez alátámasztja a rácscok közötti diffúziós mechanizmus elsődlegességét. Az oxigén atom valószínű elhelyezkedését a germánium rácsszerkezetében — gyémánthoz hasonlóan — a betöltetlen elemi cella határozza meg. Az ideális gyémánt rácsszerkezete csak félig telített, a beépült oxigénatom legvalószínűbb helye az  $\langle 100 \rangle$  irányú „hexagonális” csatorna.

A beépült oxigén — az analóg elemektől eltérően — egyéb kötések létrehozására is képes. Hasonló kölcsönhatás csak a szubsztitúciós helyzetben levő szennyezőatomra jellemző. Oxigénnek ezt a sajátos tulajdonságát először különböző szennyezők él-diszlokációval való kölcsönhatásakor sikerült megfigyelni. Az erős oxigén-rácsszerkezet kapcsolata azonban lényeges mértékben csökkenti az oxigén diffúziós állandójának értékét, ami viszont nem jellemző az analóg típusú, beépült szennyezőkre.

Felhasználva az oxigénre kapott, 500 °C és 900 °C hőmérséklet-tartományra vonatkozó aktivációs-energia értékeket, az alábbi általános összefüggés írható fel a diffúziós koefficiensre:

$$D_{0 \rightarrow \text{Ge}} = 0,267 \exp(-47\,000/RT). \quad (1.35)$$

A  $D_{0 \rightarrow \text{Ge}}$  diffúziós koefficiens értéke  $T = 500$  °C hőmérsékleten  $\sim 10^{14}$  cm<sup>2</sup>/sec; így, a lítium-diffúzió feltételei mellett az oxigén behatolása a felületről gyakorlatilag jelentéktelen.

Oxigént tartalmazó germánium-mintákon elvégzett elektromos mérések igazolták, hogy az oxigén mind neutrális, mind pedig töltött állapotban létezhet, a hőkezelés körülményeitől függően. Megállapították [35, 36, 37], hogy az oxigén a germániumban több átalakulási fázison áthaladva  $\text{Ge}^*\text{O}_4$  típusú metastabil donor komplexumot alkot. Ezzel egyidejűleg a semleges oxigén atom és germánium-dioxid molekulák létezése egyaránt lehetséges.

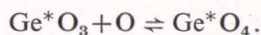
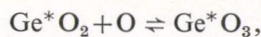
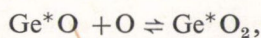
A donor-egyensúly vizsgálata kimutatta a következő reakciófolyamat létezését:



ahol N a semleges atomi oxigén,  $\text{D}^+$  a  $\text{Ge}^*\text{O}_4$  komplexum.

A fenti reakció folyamat több egymást követő átalakulásból áll össze; ezeknek az átalakulásoknak mindegyike egy meghatározott energetikai szintű donor kapcsolatnak felel meg.

Fuller [38] az (1.36) reakciófolyamat kinetikáját — hélium hőmérsékletektől kezdődően — vizsgálva az alábbi reakció sorozatot kapta:

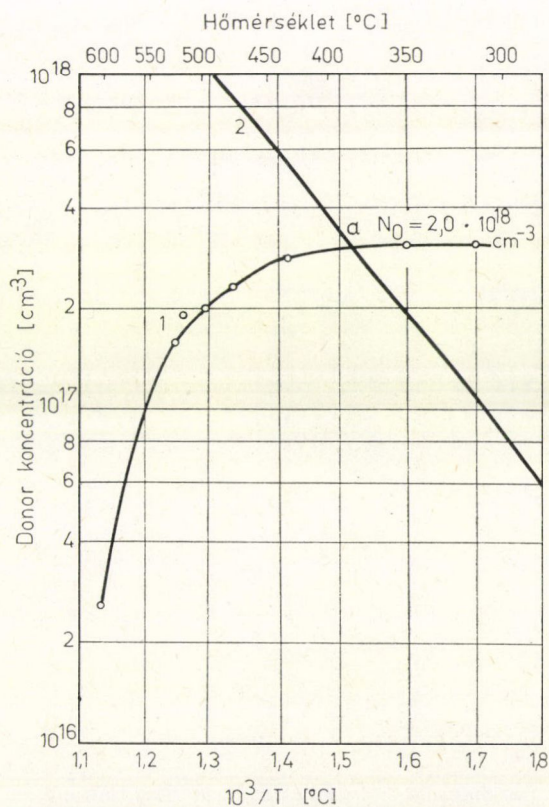


Az egyes komplexumoknak megfelelő ionizációs energiák:

$$\text{Ge}^*\text{O}_2 \quad E_D = 0,2 \text{ eV},$$

$$\text{Ge}^*\text{O}_3 \quad E_D = 0,04 \text{ eV},$$

$$\text{Ge}^*\text{O}_4 \quad E_D = 0,017 \text{ eV}.$$



1.12. ábra. Donor-egyensúly kinetikája  
2 · 10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup> oxigén atomot tartalmazó germániumban



Az 1.12 ábra a donoregyensúly kinetikáját szemlélteti  $2,0 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  oxigén atomot tartalmazó germániumban. Az 1. görbe a donorkoncentráció változását mutatja hőmérséklet függvényében. Látható, hogy a donoregyensúly  $350^\circ\text{C}$  alatti hőmérsékleteken következik be, amikor a teljes oxigéntartalom és a donorkoncentráció aránya 4. Ez alátámasztja a  $\text{Ge}^*\text{O}_4$  komplexum létezését. A donorkoncentráció csökkenése viszont a hőmérséklet emelkedésével azt jelzi, hogy a saját elektron koncentráció kerül túlsúlyba (2. görbe: a pont).

Számos akceptor-szennyező donor-oxigén között állapítottak meg kölcsönhatásokat. A  $4 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  indium és  $7 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  oxigéntartalmú germániumban,  $400^\circ\text{C}$ -ról történő gyors lehűtés után 1,7 ohm cm fajlagos ellenállású elektronvezetést figyeltek meg.

Hasonló jelenség figyelhető meg dopolt germánium Csohralszkij-módszerrel történő kristályhúzása esetén is. Ebben az esetben a leghatékonyabb kompenzálás az egykristály külső részén várható, mivel ezt, a belső résznél gyorsabb hűtés éri.

Legrészletesebben az oxigén és a réz közötti kölcsönhatást tanulmányozták germániumban [39, 40]. Különböző hőkezelési feltételek mellett kimutatták, hogy két oxigén atom egy réz atommal kölcsönhatásba lépve elektromosan semleges komplexumot hoz létre, mikor is a germánium tiltott sávjában a réz mindhárom energia nívója feltöltődik.

A korábban megvizsgált lítium és az oxigén közötti kölcsönhatási reakció (1.34) a germániumban is teljes valószínűséggel lehetséges. Különösen lényeges szerepe van annak, hogy a  $\text{LiO}^+$  komplexum ugyanolyan donor, mint a  $\text{Ge}^*\text{O}_4$  komplexum. Következésképpen, lítiumion driftje esetén (megfelelő oxigéntartalom mellett), a kompenzációval egyidejűleg, donorközpontok kialakulása is lehetséges. Ez a körülmény nagyon lényeges az alapanyag optimális paramétereinek kiválasztásánál.

## 2. FEJEZET

### NAGYFELBONTÓKÉPESSÉGŰ Ge/Li DETEKTOR KIALAKÍTÁSA ÉS ENNEK KAPCSÁN VÉGZETT VIZSGÁLATOK

#### 2.1. Az n-i-p detektor készítésére alkalmas germánium főbb jellemzőinek meghatározása

##### 2.1.1. Kisebbségi töltéshordozók koncentrációja és élettartama

Sajátvezetésű, kompenzált tértöltéstartomány csak a lítium és a gallium ionok teljesmértékű párképzése esetén valósul meg, ezért a drifttartományban (1.30), illetve (1.31) reakciók figyelembevételével:

$$N_{[\text{Li}^+ \text{Ga}^-]} = N_{\text{Li}_s}. \quad (2.1)$$

A driftelési folyamatban e feltétel teljesül, ha a 2.1 ábrán látható Li oldékonyság, illetve a kisebbségi töltéshordozók hőmérsékletfüggését ábrázoló görbék metszéséből adódó (a-b-c-) tartományon belül dolgozunk [41]. Az egyensúlyi állapotra vonatkozó és

a szennyezés vezetési korlátozásából adódó megfontolások alapján a dopolt germánium akceptor koncentráció határértéke, 300 K hőmérsékleten:

$$2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3} \cong N_{pn} \cong N_A N_{Li_s} = 2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}, \quad (2.2)$$

vagy fajlagos ellenállásra átszámítva:

$$45 \text{ ohm cm} \cong \varrho \cong 3 \text{ ohm cm}. \quad (2.3)$$

Az a-b-c háromszög figyelembevételével, a lítium iondrift hőmérsékletére vonatkozó feltétel:

$$25^\circ\text{C} \cong T_d \cong 75^\circ\text{C}. \quad (2.4)$$

A b pont a  $T_d$  maximális drifthőmérsékletnek felel meg: e felett az n-p átmenet megszűnik.

A kisebbségi töltéshordozók kinetikai tulajdonságaival szemben támasztott követelmények, a kisebbségi töltéshordozók detektoron való áthaladási idejére és a detektor felbontóképességére vonatkozó megfontolásokból adódnak [42, 43].

Számítások alapján germániumban a töltéshordozók futási ideje  $t_f \sim 15\text{--}20 \mu\text{sec}$ , míg a gamma-spektrométer  $\sim 1\%$ -os FWHM eléréséhez szükséges idő:

$$\tau = (5\text{--}10) \cdot 10^2 \cdot t_f = 1500\text{--}2000 \mu\text{sec}. \quad (2.5)$$

ahol  $\tau$ , a kisebbségi töltéshordozók élettartama.

A (2.2) alatti összefüggéssel kifejezett koncentráció-tartományra az élettartam meghatározható a töltéshordozók koncentrációjának függvényében [44] [2.2 ábra].

$$500 \mu\text{sec} \cong \tau \cong 2000 \mu\text{sec} \quad (2.6)$$

Az élettartamot jelentős mértékben befolyásolják a különböző szennyezők mélyen fekvő energiaszintjei. Ez a körülmény detektorminőségű germánium egykristály húzása esetén kiegészítő tisztítási műveletek elvégzését teszi szükségessé.

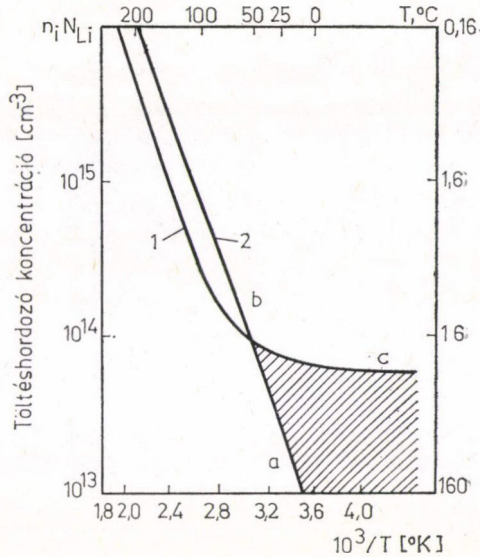
Figyelembe véve, az élettartam és a töltéshordozók koncentrációja közötti összefüggést, a fajlagos ellenállás optimális tartománya ( $T=300 \text{ K}$ )

$$10 \text{ ohm} \cdot \text{cm} \cong \varrho \cong 45 \text{ ohm} \cdot \text{cm}. \quad (2.7)$$

### 2.1.2. Kristályszerkezet jellemzői és kristályhibák

Lítiumion mozgékonyasága a rácsszerkezet anizotrop tulajdonságának függvényében az alábbi módon fejezhető ki [26]:

$$\mu = D \cdot \frac{q}{kT} = D_0 \exp(-Q/RT) \cdot \frac{q}{kT} = \frac{d^2 Q}{N h} \cdot \exp(-Q/RT) \cdot \frac{q}{kT} \quad (2.8)$$

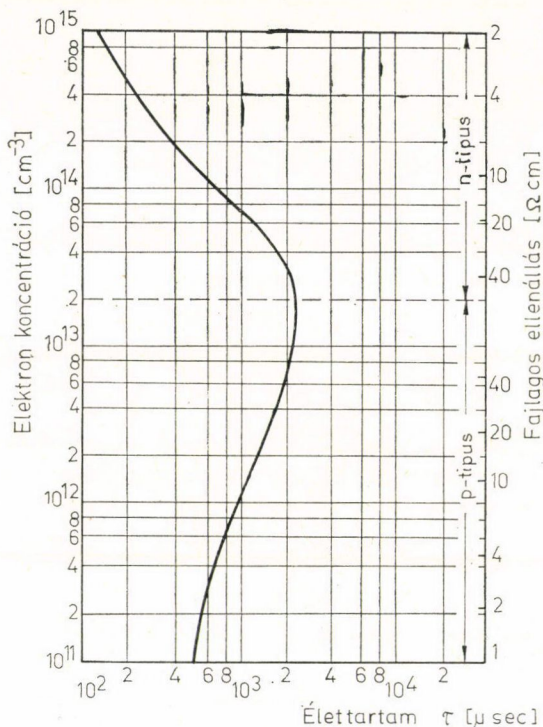


2.1. ábra Li-oldékonyság hőmérséklet függése.



ahol  $d$  a rácsszerkezet laptávolsága;  $Q$  aktivációs energia;  $h$  Planck-féle állandó;  $q$  ion töltése;  $T$  hőmérséklet;  $N$  Avogadro-féle szám;  $R$  univerzális gázállandó;  $k$  Boltzmann-féle állandó.

A rácsszerkezet  $d$  laptávolsága  $T = \text{const}$  hőmérsékletű driftelés esetén  $\mu$  független változójaként kezelhető. Ugyanakkor, a mozgékonyság jelentős mértékben függ a különböző szennyezők koncentrációjától ( $N_x$ ), illetve azok természetétől.



2.2. ábra Töltéshordozók koncentráció és élettartam közötti összefüggése.

Lítium drift-profil megfigyelése koaxiális típusú n-i-p szerkezetű detektorok készítésekor a germánium kristályszerkezetének izotrop jellegére utal. Az 1.8. ábra mutatja az  $\langle 111 \rangle$  irányban növesztett egykristály térfogatában megjelenő Li-iondrift profilt [45]. Az i-p-átmenet kontúrja (driftprofil) a mérési hibák pontosságával a kristály felületének körvonalát követi.

A rácsszerkezet megfelelő izotrópiája esetén, az  $\langle 111 \rangle$ -t, mint a legtöbb szimmetria elemeket tartalmazó irányt előnybe kell részesíteni. Ezenkívül az  $\langle 111 \rangle$  kristálysík metallográfiai szempontból is a legrészletesebben tanulmányozott, így a lineáris hibákon kívül a ponthiba felhalmozódások egyszerű megfigyelésére is lehetőség van.

A germánium rácshibáinak szerepét célszerű megvizsgálni egyrészt n-i-p struktúra kialakítási folyamatában, másrészt a kisebbségi töltéshordozók élettartamára gyakorolt hatása kapcsán.



A reális egykristály növesztési és hűtési folyamatában keletkező diszlokációk befolyásolják a Li-ionok diffúziós rétegbeni (n-réteg), illetve a drifttartománybani (i-tartomány) kinetikáját. Ez szükségessé tette a hibahelyek kialakulási feltételeinek tanulmányozását [46]. Megállapították, hogy a diszlokációs tér, a kristály rácsszerkezetébe beépült szennyezőkkel kölcsönhatva szennyező atmoszférát (Cotrell-atmoszférát) hoz létre [47].

Különböző feltételek mellett növesztett egykristályoknál [48] a diszlokációs vonal a fázishatáron jelenik meg. Mivel a krisztallizációs front közelében elhelyezkedő szilárd fázisú tartomány közel olvadási hőmérsékleten van, ezért a diszlokációs tér jelenléte a szabad diszlokációs kötések szennyező atomokkal történő maximális kitöltését eredményezi. Ebben az esetben a diszlokáció mozgékonyasága, s következtésképpen, a pontszerű hibahelyek generációja jelentős mértékben lecsökken.

A kristályhúzási folyamatban a pontszerű rácshibák és vakanciák között termodynamikai egyensúlyi állapot jön létre. Vakancia-koncentráció hőmérsékletfüggése az alábbi összefüggéssel írható fel [26].

$$N_v = 3 \cdot 10^{13} \exp(-46\,300/RT). \quad (2.9)$$

A fenti összefüggésből a germánium olvadási hőmérsékletén a vakancia-oldékonyság határértéke  $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .

Szilárd fázis folyamatos hűtése vakancia túltelítődést eredményez, s következtésképpen szükségessé teszi a felesleg eltávolítását az egyensúlyi állapot elérése előtt. Ennek számos módzata lehetséges. Így a vakanciák a felülethez, illetve a diszlokációk mentén migrálhatnak. A vakanciák azon hányada, mely nem tud megsemmisülni, szilárdfázisba megy át, így bizonyos mértékű túltelítés jön létre: ez maximális értékű a diszlokáció nélküli germániumban, ahol a vakanciahelyek koncentrációja  $3\text{--}4 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  [48].

Diszlokációk jelenléte esetén jelentős mértékű vakancia-koncentráció csökkenés figyelhető meg germániumban. A vakancia-koncentráció és a diszlokációs sűrűség közötti összefüggésre vonatkozó irodalmi adatok nem teljeseek. Penning munkája alapján azonban becsléssel élhetünk [49]:  $10^3\text{--}10^4 \text{ cm}^{-2}$  diszlokációs sűrűségű mintákban a vakanciahelyek száma nem haladja meg a  $2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$  értéket.  $10^4 \text{ cm}^{-2}$  diszlokációs sűrűséget túllépve vakancia-generációra kell számítani. Ez a folyamat a Ge-ban vázlatosan úgy képzeltethető el, hogy a diszlokációk egy része Cotrell-atmoszféra nélkül marad, ui. a mozgékony szennyezőatomok száma az adott térfogatban korlátozott. Elegendően nagy, visszamaradt, rugalmas feszültség a diszlokációs vonal elmozdulását eredményezi, az azonos valószínűségű csúszási vagy nyírási mechanizmusnak megfelelően [50].

Mindkét esetben a diszlokációs sík éle vakancia tracket eredményez, amely beépül a kristály térfogatába. Ezt a feltételezést igazolja a [33]-ban közölt eredmény:  $(6.9) \cdot 10^4 \text{ cm}^{-2}$  diszlokációs sűrűség esetén a vakanciahelyek koncentrációja  $2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ -ra tehető. Könnyen belátható, hogy a legkisebb vakancia-koncentrációnak a  $10^3\text{--}10^4 \text{ cm}^{-2}$  intervallumba eső diszlokációs sűrűség felel meg.

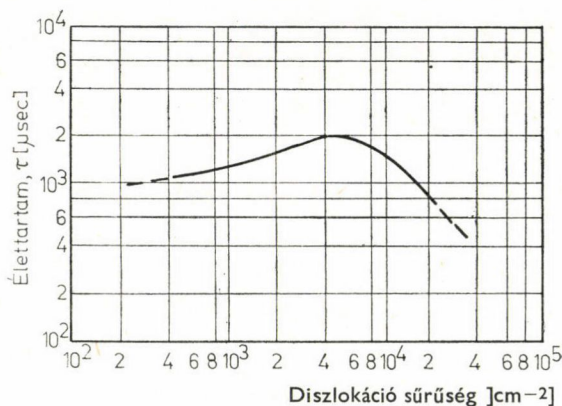
A diszlokációk fontos szerepet játszanak a kisebbségi töltéshordozók rekombinációs folyamataiban. Irodalmi adatok [51, 52] alapján, germániumban a töltéshordozók maximális élettartama  $5\text{--}6 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-2}$  diszlokációs sűrűség tartományába esik (2.3 ábra).



Figyelembe véve a kisebbségi töltéshordozók élettartamára, továbbá a lítiumion, akceptor kölcsönhatásra vonatkozó összefüggéseket, a diszlokációs sűrűség optimális intervallumára az alábbi kifejezést kapjuk:

$$1 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-2} \leq N_d \leq 6 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-2}. \quad (2.10)$$

Ebben az esetben makroszkopikus hiba, diszlokáció-felhalmozódás, repedés, stb. nem fordulhat elő.



2.3. ábra Töltéshordozók élettartam függése Ge-ban a diszlokáció sűrűség függvényében.

### 2.1.3. Az oxigén koncentrációja és előfordulási formája

Pell szilíciumra vonatkozó számításai [31], továbbá a lítium precipitáció kinetikája [33], illetve a Reiss elmélet tételei [32] alapján kimutatható, hogy a germániumban a lítium oldékonyságával összemérhető mennyiségben jelenlevő oxigén, befolyásolja az n-i-p struktúra kialakítását.

Mint azt az 1.4.1. pontban kimutattuk, az (1.33) reakció a precipitáló magok kialakulását eredményezi: következképpen, ez a folyamat elősegíti a túltelített lítium-oldat kimerülését a diffúziós rétegben. Fenti reakció figyelembevételével a  $D_{\text{eff}}$  effektív diffúziós tényező értéke az alábbi összefüggéssel fejezhető ki:

$$D_{\text{eff}} = D_0 \frac{[\text{Li}^+]}{[\text{Li}^+] + [\text{LiO}^+]}, \quad (2.11)$$

ahol  $D_0$  a lítium diffúziós tényezője oxigént nem tartalmazó germániumban. Egyszerűsítések után az alábbi kifejezést nyerjük:

$$D_{\text{eff}} \cong D_0 \frac{C}{\text{NO}_2}, \quad (2.12)$$

ahol  $\text{NO}_2$  az oxigénkoncentráció;  $C$  az (1.33) alatti reakció diszlokációs állandója:

$$C = \frac{[\text{Li}^+] \cdot [\text{O}]}{[\text{LiO}^+]}. \quad (2.13)$$

A (2.11) → (2.24) → (2.23) sorrendnek megfelelő behelyettesítést elvégezve az alábbi összefüggést kapjuk:

$$W^2 = 2D_0 c \frac{q}{kT} \cdot Vt \frac{1}{\text{NO}_2}. \quad (2.14)$$

A kapott összefüggés az alapanyagban levő trap-centrum koncentráció meghatározása szempontjából jelentős. Germániumra az irodalomban hiányoznak a  $C$  diszlokációs állandóra vonatkozó adatok, azonban az oxigénre alkalmazott metodika felhasználásával a  $W$  drift mélység közvetlen mérése esetén a (2.14) alatti összefüggésből kiszámítható  $C$  értéke. Ebben az esetben  $D_0$  elegendő pontossággal az 1.9 ábrán látható 1. görbének felel meg.

Feltételezve, hogy a germániumban levő oxigén aktív donorok formájában helyezkedik el,  $W=1$  cm-es maximális driftmélységre becslést végezhetünk az oxigén koncentráció felső határértékére. Az n-i-p struktúra anyagi egyensúlyát kifejező (1.25b) összefüggésből az oxigénscapdák számára a következő egyenlet írható fel:

$$N_x = (N_0 - N_A) \frac{c}{W\sqrt{\pi}} - N_A. \quad (2.15)$$

Ideális esetben  $N'_0 = N_A$ , így az optimális diffúziós és driftparaméterek:

$$N_0 = 10^{17} \text{ cm}^{-3} (T=400^\circ\text{C} - 425^\circ\text{C});$$

$$c = 0,03 \text{ cm} (t=5' - 10')$$

$$W = 1 \text{ cm}$$

$$N_A = 2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}.$$

Ezek felhasználásával:

$$N_{\text{O}_2} = (10^{17} - 2 \cdot 10^{14}) \cdot \frac{0,03}{1 \cdot \sqrt{\pi}} - 2 \cdot 10^{14} = 3,18 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}. \quad (2.16)$$

Az 1.12 ábrán látható — 1. görbe —, donor oxigén koncentráció nagy valószínűséggel a lítium hőkezelésével magyarázható. Az 1. görbe minden egyes pontját 350—400 °C hőmérsékletre történő lehűtéssel kapjuk: hasonló folyamat zajlik le a Li-diffúzió folyamán is, amikor a 400—425 °C hőmérsékletre felmelegített germánium gyorsan hűl le szobahőmérsékletre.

A diffúzió során keletkező oxigén-donorokat vizsgálva az 1. görbéből látható, hogy a 600 °C-ig megvalósított hőkezelés az oxigéndonorok teljes lebomlását eredményezi, a  $\text{GeO}_2$  molekulák keletkezéséig. Ezt követve alátámasztja az irodalomban közölt kísérlet is, melyben a kompenzált n-i-p szerkeztű germánium detektor 600 °C hőmérsékleten végzett hőkezelésével sikerült a gamma-spektrométer felbontóképességét 2—3-szorosára javítani.



Az oxigén szerepe germániumban nem csupán a driftelődő lítiumionok befogására korlátozódik. A három különböző szintű donorállapot lényegesen befolyásolhatja a kisebbségi töltéshordozók rekombinációját. Az oxigén koncentráció  $3,18 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  számított felső határértéke meghaladja az akceptor koncentráció  $2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  értékű felső határértéket. Következésképpen, a lítiumionok egy része az i-tartományban, az (1.33) alatti reakciónak megfelelően,  $[\text{LiO}^+]$  donorkomplexumokat alkotnak, melyek jelentős mértékben befolyásolják a töltéshordozók rekombinációs sebességét.

A nagy élettartam fenntartása érdekében az oxigénkoncentrációra végeredményben az alábbi feltételt célszerű elfogadni:

$$N_{\text{O}_2} \leq N_A = 2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}. \quad (2.17)$$

## 2.2. n-i-p struktúra előállításával kapcsolatos eljárás

### 2.2.1. Ge/Li detektorok készítéséhez felhasznált alapanyag jellemzők

Ge/Li detektorok készítéséhez és a vizsgálatokhoz — az előző pontban leírt megfontolások alapján kiválasztott paraméterekkel rendelkező — p típusú galliummal dopolt germánium egykristályt alkalmaztunk [53]. A különböző forrásokból származó, s a kísérleteknél felhasznált germánium egykristály főbb jellemzőit a 2.1 táblázat foglalja össze.

### 2.1. TÁBLÁZAT

Germánium egykristály öntecsek — és ezekből készült Ge/Li detektorok — főbb paraméterei: [54, 55, 56]

Paraméterek	Kiindulási anyag eredete		
	Hoboken	Sylvania	SzU
$\tau$ [μsec]	500	500	1000
EPD [ $\text{cm}^{-2}$ ]	2000	5000	10 000
EPD homogenitás	10 %	20 %	25 %
$\rho$ [ohm·cm]	20—30	20—30	20—30
$\rho$ radiális diszperziója	5 %	10 %	20 %
$\rho$ axiális diszperziója	5	15	15
Oxigén koncentráció [ $\text{cm}^{-3}$ ]	$10^{13}$	$10^{14}$	$10^{14}$
Drift sebesség	gyors	lassú	gyors
FWHM [keV]	3	5	6
$U_D$ [V]	800—2500	1000	600

A kristályminták felhasználásával mind planár, mind koaxiális konfigurációjú, 1—40  $\text{cm}^3$  érzékeny térfogattal rendelkező Ge/Li detektorok készültek. A továbbiakban részletesen tárgyaljuk a nagy érzékeny térfogatok előállítására alkalmas lítium kompenzációs eljárást [57, 58, 59, 60, 61].



### 2.2.2. Germánium előkészítése diffúzióhoz

#### 2.2.2.1. Alapanyag mechanikai megmunkálása

A germánium öntecsből  $S^-$  a szükséges méretű szeleteket a kristály növesztési irányára merőlegesen daraboljuk. A vágást a félvezető öntecsek szeletelésére szolgáló külső vagy belső, 0,2 mm-es vágóélű, tárcsás gépek alkalmazásával végezzük; a vágás ideje függ az öntecs átmérőjétől, s az alkalmazott csiszolópor szemcse méretétől.

A vágással okozott mechanikai roncsolás nem haladja meg az alkalmazott szemcseméret kétszeresét. Durva szemcseméret növeli a vágás sebességét, de ugyanakkor növeli a csiszolás idejét is. Ennek megfelelően a finomabb szemcseméret kis vágási sebességet eredményez, de megkönnyíti az ezt követő csiszolást: eszközünkben 600-as SiC csiszolóport alkalmaztunk szuszpenzióban. A szeleteléssel előkészített germánium lapkák, illetve hengerszeletek lapfelületét 600–800-as  $Al_2O_3$  porral való csiszolás után 7  $\mu$ , 3  $\mu$ , 1  $\mu$ -os gyémántpasztával tovább csiszoljuk, majd 0,25  $\mu$ -os gyémántpasztával polírozzuk.

Az éleket lepattogzásuk elkerülésére  $0,5 \times 45^\circ$ -ban fazettázzuk.

#### 2.2.2.2. Kémiai előkészítő műveletek

A mechanikailag megmunkált egykristály mintadarabot szénterakloriddal, vagy trikloretilénnel zsírtalanítjuk, melyet acetonban, alkoholban történő öblítés követ. A mintadarab ezután kvarcdesztillált vízzel kerül lemosásra.

A fenti műveletek közötti szárítás szűrőpapírral történik. A megtisztított mintadarabot az alábbi sorrendben végzett maratásokkal készítjük elő lítium felvitelre.

konc.  $HNO_3$ -ban — 1'-ig

3:1 ( $HNO_3$ :HF) marófolyadékban — 30"-ig

3:1 ( $HNO_3$ :HF) marófolyadékban —  $2 \times 1'$ -ig.

A maratást minden esetben  $2 \times$  kvarcdesztillált vízzel szakítjuk meg. A nagy hőmérsékleten végzett marás rossz minőségű felületeket eredményez, ezért ennek elkerülésére a maró-elegyet a marás megkezdése előtt minimum 30'-el kell elkészíteni, vagy hűtés alkalmazása szükséges.

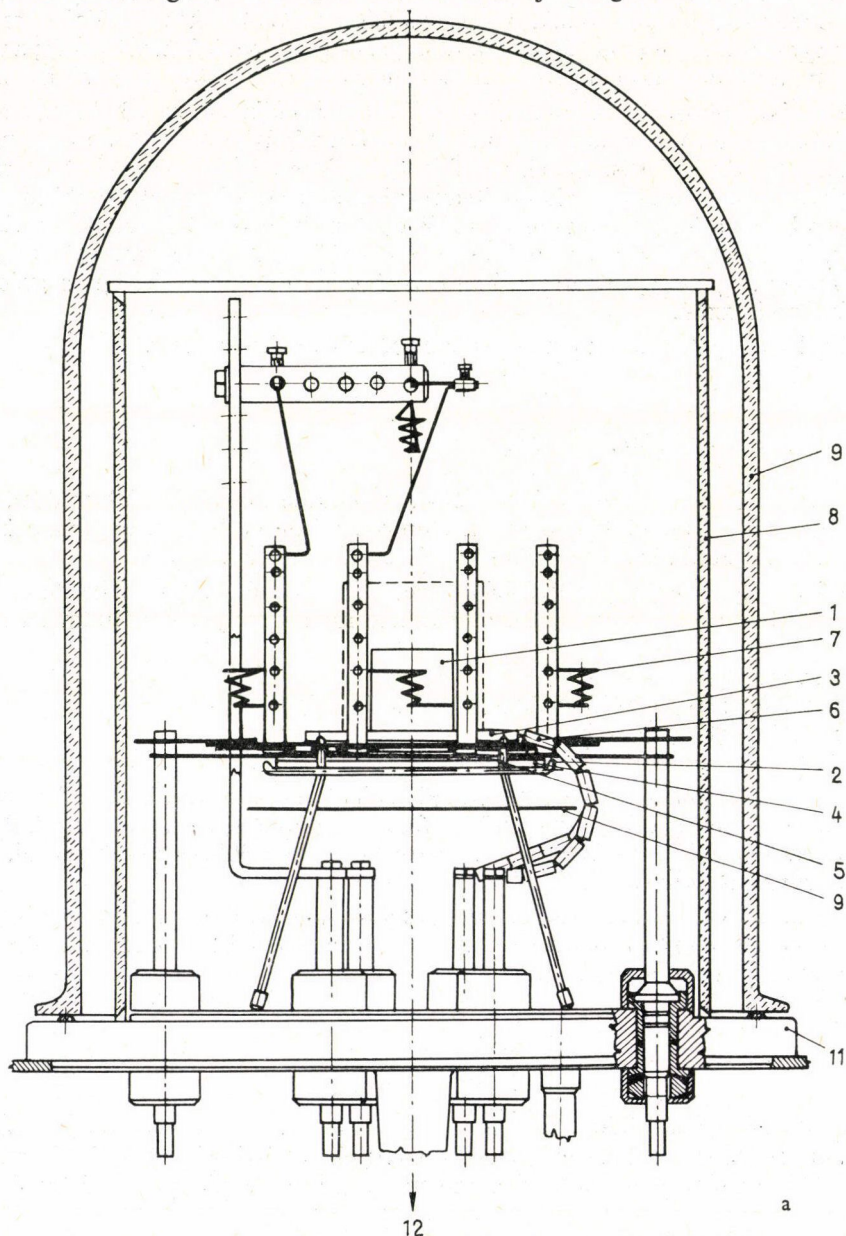
A marási folyamattal kialakul a végleges felület, eltávolítottuk a mechanikai behatás következtében károsodott germánium réteget, s ezzel lecsökken a Li diffúziót gátló befogási centrumok száma.

#### 2.2.2.3. Diszlokációk előhívása

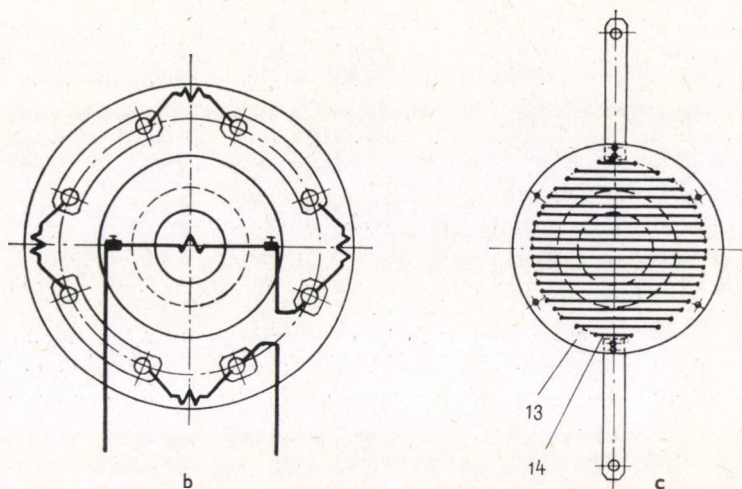
A marással előkészített mintát 20 órán keresztül szobahőmérsékleten  $HF:HNO_3:COOH$  (1:3:12) maróelegyben tartjuk a diszlokációk előhívására. Ezt követően a mintát ioncserélt vízben mossuk, szárítjuk, majd mikroszkóppal vizsgáljuk.



A legtöbb esetben nagy diszlokáció sűrűség a minta pereméhez közel található. Amennyiben a rácshiba palástcsiszolással eltávolítható, úgy alkalmassá válik további feldolgozásra. Nagy diszlokáció sűrűség, vagy egyéb hibahelyek megjelenése esetén a minta nem használható. A diszlokációs kép eltávolítását követően a fent leírt előkészítő műveletek megismétlése után a lítium diffúziója elvégezhető.







2.4. ábra. Li-vákuum gőzölés és diffúzió elrendezési vázlata

a, vákuumkamra b, multispirál forrás c, fűtőtest

1. Ge-minta 2. Melegítő asztalka 3. Grafit alátét 4. Zafir szigetelő
5. Fűtő spirál 6. Thermopár 7. Multispirál Li gőzöléshez 8. Kvarc csésze 9. Hőtükör (reflektor) 10. Üveg búra 11. Vákuumkamra alap lemez 12. Diffúziós szivattyúhoz 13. Csillám szigetelt kivezetések 14. Wolfram szál

### 2.2.3. Li-diffúziója germániumban

A kémiaileg előkészített mintadarab 1.8. ábrán látható felületére a Li felvitele kétféle módon valósítható meg: Li vákuumgőzölésével, illetve Li olajsuszpenzióval semleges gázatmoszférában.

#### 2.2.3.1. $n^+$ réteg előállítása vákuumgőzöléssel

A mintadarabot a 2.2.2.2. pontban leírt kezelése után a 2.4. ábrán látható elrendezésben a vákuumgőzölő térbe helyezzük. A fém-lítium gőzölése planár mintadarabnál egy, míg koaxiális konfiguráció esetén minimálisan 5 db wolfrám-kosárból történik. A fém-lítium kosaranként kb. 50 mm<sup>3</sup>.

A fém-lítiumot darabolás után, vákuumtérbe való helyezés előtt trikloretilénben és alkoholban tisztítjuk. Előre elkészített forrás esetén a Li-t wolfrám-kosárba olvasztjuk, majd üvegcsőbe helyezve vákuum alatt lezárjuk. Felhasználáskor az üveget feltörjük és a forrást rövid idő alatt a gőzölő térbe szereljük. A gőzölésnél a források kötése soros, ezek ellenállása azonos.

A fém-lítium gőzölése kb.  $5 \times 10^{-5}$  Hg mm vákuum elérése esetén indítható. A mintadarab hőmérsékletét toroid-trafóval történő fűtés szabályozásával 425—



—450 °C-ra melegítjük (kb. 30' alatt). A felmelegített mintadarabra történő Li gőzölés s egyben a diffúzió ideje 5—7 perc.

Planár konfiguráció gőzölésénél a lapka élet aquadaggal védjük a szennyeződés elkerülésére.

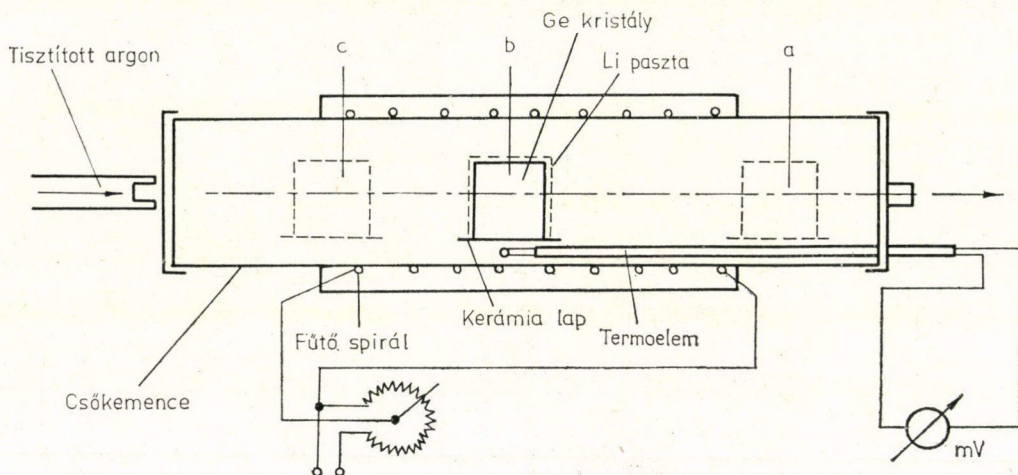
A Li diffúzió után gyors hűtés következik, melynek ideje 30 perc.

### 2.2.3.2. $n^+$ réteg előállítása olajsuszpenzió alkalmazásával

A mintadarab 2.2.2.2. pontban leírt kezelése után annak egyik lapját aquadaggal vonjuk be, melyet infralámpával szárítunk.

A Li paszta felkenése teflon pálcával kb. 20—50  $\mu$  vastagságban történik.

Az így előkészített mintadarabot — közvetlenül a Li paszta felkenése után — a 2.5 ábrán látható elrendezésben tisztított argon öblítésű csőkemencébe helyezzük.



2.5. ábra. Argon öblítéses csőkemence olajsuszpenzióból megvalósított Li-diffúzióhoz

A csőkemence felfűtési sebessége: 100 °C/óra.

A Li pasztával ellátott mintadarabot a csőkemencében (a) 250 °C-on tartjuk, az olaj teljes elégéséig. Ezután kerül át a mintadarab a (b) helyre, ahol 400—450 °C-ra melegítjük: a diffúzió időtartama 10—15 perc. Ezt követően végezzük a kristály (c) 50 °C-ra történő lehűtését. A hűtés sebessége: 200 °C/óra.

### 2.2.3.3. Diffúziót követő előtisztítás

A 2.2.3. pontban leírt eljárások után a felületen visszamaradt felesleges Li eltávolítását végezzük el. A kb. 50 °C-os mintadarabot 60 °C-os alkoholban 5'-ig, majd azonos módon kvarcedesztillált vízzel állni hagyjuk. Ezt követően a desztillált vizes mosás közben mechanikus tisztítással, dörzsöléssel távolítjuk el a felületen található



Li-t. A végső tisztítást alkoholban végezzük, majd az ezt követő desztillált vizes mosás után szűrőpapírral szárítjuk.

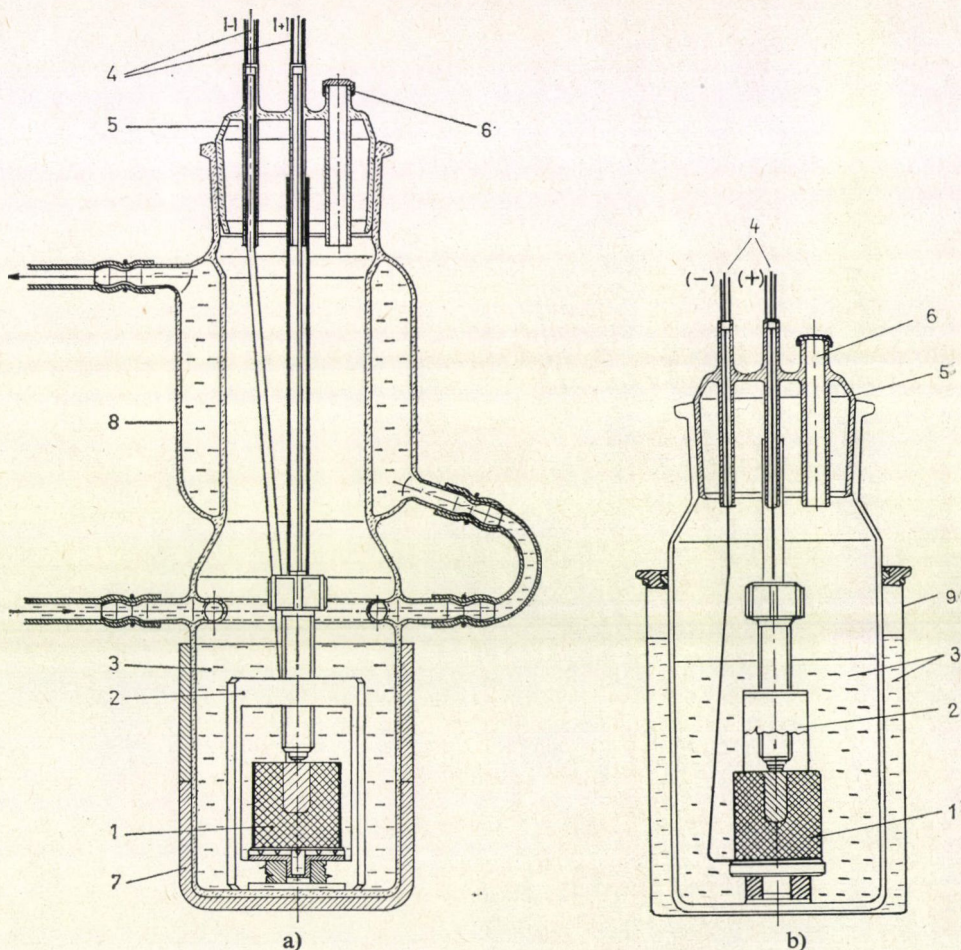
A félvezető felületek további tisztítása az alábbi sorrendben végzett maratással történik:

koncentrált  $\text{HNO}_3$ -ban 1'-ig

3:1 ( $\text{HNO}_3$ :HF) összetételű marófolyadékban 30"-ig

3:1 ( $\text{HNO}_3$ :HF) összetételű marófolyadékban  $3 \times 1'$ -ig.

A maratást minden esetben  $2 \times$  kvarcdesztillált vízzel szakítjuk meg.



2.6. ábra. Driftelés és clean-up elrendezési vázlata

1. minta, 2. mintatartó, 3. pentán, 4. kivezetések, 5. csiszolt dugó, 6. thermométer, melegítő elhelyezésére szolgáló, továbbá pentán utántöltésére használható nyílás, 7. hőszigetelő, 8. vízhűtő köpeny pentán hűtésre, 9. fémedény

a) ábra Hűtőkörös üvegedény drifteléshez

b) ábra Fémköpenyes üvegedény clean-up-hoz



Az így előkészített diódát polietilén pohárra helyezzük úgy, hogy a Li-al be nem vont felület kezelhető legyen. Az n-p átmenet tisztítása — polietilén cseppentővel — 3:1 ( $\text{HNO}_3$ :HF) összetételű marófolyadékkal történik kb. 5–15×.

Planár konfiguráció palást marásánál a mintadarab lapjait szilikon gumi betéttel rendelkező teflon szorítóval védjük, mely egyben a minta marás közbeni mozgását is lehetővé teszi.

Minden maratást  $2\times$  kvarcdesztillált vízzel szakítunk meg — ezt követően a mintát szűrőpapírral szárítjuk.

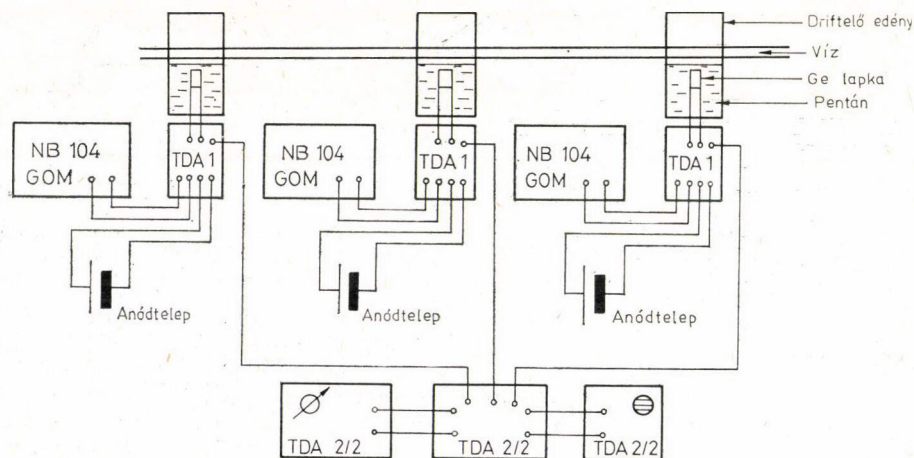
#### 2.2.4. Driftelés

A maratással megtisztított felület centrumába kb.  $0,5 \text{ cm}^2$ -nyi foltban Ni-réteget viszünk fel. A kontaktált diódát a záró és nyitó irányú karakterisztika felvétele után a driftelő edénybe helyezzük.

A driftelési vázlatot a 2.6 ábra szemlélteti. A driftelést pentánban végezzük ( $T_f = 36^\circ\text{C}$ ) [62, 63].

A driftelés kezdeti szakaszában csak 10 mA záróirányú áram engedhető meg: a feszültséget ennek megfelelően állítjuk be. A 24 óra elteltével a feszültség folyamatos növelésével olyan áram értékeket állítunk be, melynél a pentán forrni kezd. Ez  $20 \text{ cm}^3$ -es térfogatnál 30 W teljesítmény felvételt jelent ( $1000 \text{ V}/30 \text{ mA}$ ).

A driftelés automatikusan is végezhető az általunk készített TDA-1 és TDA-2 egységek felhasználásával. Ez lehetővé teszi a folyamatos üzem fenntartását — s a kiépített TDA-3 típusú jelzőrendszer útján kritikus esetekben a szükséges riasztást. (2.7. ábra).



2.7. ábra. Automatikus driftelő rendszer blokkvázlata



#### 2.2.4.1. Automatikus driftelés

A TDA-1 két db NB-104 típusú tápegység kimenetére kapcsolódik. A detektor az automatikán keresztül kap feszültséget, mely egyben ellenőrzi az előre beállított áramerősség, illetve driftelő-feszültség értékét. Ha a driftelési áram eléri az előre meghatározott maximumot, akkor az automatika kisebb feszültségre és az előre meghatározott értékre korlátozott áramra kapcsolja a detektort.

Az automatikában külön rész ellenőrzi az állandó driftelő feszültséget: amennyiben tápegység meghibásodás, vagy áramszünet miatt nincs megfelelő driftelő feszültség, úgy az automatika védőfeszültségre kapcsol.

#### 2.2.4.2. Drift ellenőrzés

A driftelés előrehaladásának sebességét színezéssel határozzuk meg.

A záróirányban előfeszített dióda  $n^+$ -i-p felületére  $(\text{Cu}(\text{NO}_3)_2)$  vizes oldatát csepegtjük.

A réz a p-tartományon válik ki, az i-réteg növekedése így figyelemmel kísérhető.

A kívánt térfogat elérése után a driftelést megszakítjuk. Ellenőrizzük a dióda I—V karakterisztikáját. Amennyiben minősége romlott, úgy a 2.2.3. pontban leírtak megismétlése szükséges.

#### 2.2.5. Clean-up eljárás

A tökéletes kompenzáció elérése érdekében alacsony hőmérsékletű driftelést ún. clean-up-ot kell végezni [64]. Ez két lépésben történik:  $0^\circ\text{C}$ -on, illetve  $-10^\circ\text{C}$ -on. A clean-up vázlatot a 2.6.b ábra szemlélteti. Mindkét esetben olyan feszültséget kapcsolunk a diódára, hogy a záróirányú áram ne haladja meg az 5 mA-t. Clean-up eljárás ideje 24, illetve 48 óra.

Ezután a 2.2.3.3. pontban leírt összes kémiai műveletet végezzük el. Ennek végeredményeképpen megkapjuk a tokozásra kész detektort.

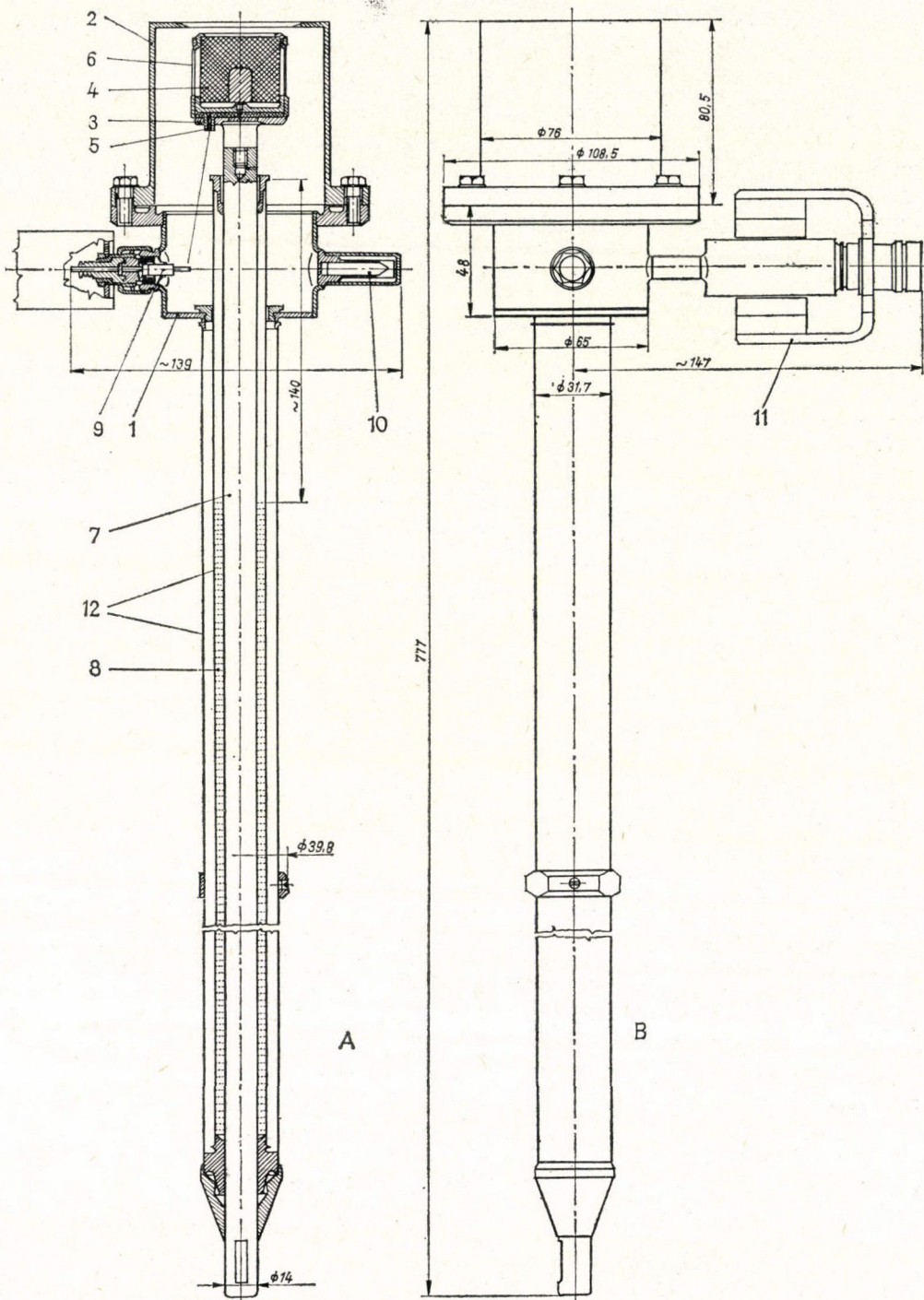
#### 2.2.6. Detektor előkészítése tokozáshoz

Ge/Li detektor kriosztátszobában elhelyezése előtt, speciális felületkezelést végeztünk a felületi szivárgási áramok csökkentése, s a maximális detektor feszültsége elérése érdekében (passziváció).

Ismételt Li felvitel után a minták tisztítását koncentrált salétomsavban végeztük, majd ezt követően  $\text{HNO}_3$  (65%) és HF (48%) 3:1 arányú keverékében marásnak vetettük alá szobahőmérsékleten ( $3 \times 1'$ ).

Passziváláshoz előkészített felületet kezdetben  $\text{H}_2\text{O}_2$  (30%) és HF (48%) 5:4 arányú keverékében vetettük alá marásnak szobahőmérsékleten ( $2 \times 1'$ ). Ezt követően a maróelegy hígítását  $\text{CaCl}_2$  oldatával végeztük (8 gr, 1000 ml vízben). 150 ml maróelegy térfogat esetén 1 perc időtartam alatt 1000 ml  $\text{CaCl}_2$  oldatot használtunk fel.





2.8. ábra. Nagy térfogatú Ge/Li detektorok tokozására szolgáló kriosztát konstrukciós vázlata  
 1. kriosztát ház, 2. detektor kamra, 3. detektor tartó, 4. Ge/Li detektor, 5.  $Al_2O_3$  alátét,  
 6. Al-ernyő, 7. hővezető, 8. zeolit, 9. vákuumzáró kivezetés, 10. kriosztát leszívó csomak,  
 11. Ti iongetter szivattyú, 12. COR-cső



### 2.2.7. Ge/Li detektor tokozása, szerelése, hűtése

A Ge/Li detektor folyékony  $N_2$  hőmérsékletén működik. A gyakorlati megvalósítás az ún. kriosztát-tokba való beszereléssel oldható meg [64, 65].

A kriosztáttal szemben támasztott főbb követelmények:

- tökéletes vákuumzárás,
- jelkivezetés biztosítás,
- Ge/Li detektor folyékony  $N_2$  hőmérsékletére való lehűtése,
- minimális ablakvastagság,
- detektor-tartó kis visszaszóróképessége,
- korrózióállóság.

A Ge/Li detektorok a fenti szempontok, s a hazai lehetőségek figyelembevételével készült kriosztátba kerültek betokozásra.

A kriosztát főbb alkatrészei:

- detektor-kamra jelkivezetővel, vákuumzáró csappal, zárófedéllel,
- Cu-hűtőrud Al tárcsával, melyre két In lapka közé kerül a kész detektor, szorítókontaktus alkalmazásával,
- COR-5-ből készült hőhíd.

A Ge/Li detektor tokozására szolgáló kriosztát elrendezési vázlatát a 2.8. ábra mutatja.

A kriosztát-tok vákuumzárásának ellenőrzése Leybold-típusú halogén lyukkereső, illetve Freon 12 jelű gáz segítségével történik.

Félvezető detektor üzembiztos működtetéséhez a tok minden egyes alkatrészét külön-külön tisztítjuk. A triklóretilén vagy széntetrakloriddal történő mosást és szárítást, alkoholos öblítés követi, amelyet újabb szárítási folyamat zár le. Az így előkészített kriosztát-rendszer alkalmas a Ge/Li detektor beszerelésére.

A zeolittal feltöltött ( $\sim 5\text{--}10\text{ cm}^3$ ) kriosztátban a gondosan előkészített Ge/Li detektor Al tárcsára helyezett indium lapkára kerül. Felső elektromos kontaktusként ugyancsak indium lapka szolgál a hozzáforrasztott Ag szállal ( $\varnothing 0,19\text{ mm}$ ). Az Ag huzal másik végének a jelkivezetőhöz való forrasztása után a kriosztátot lezárjuk.

A 2.9. ábra a planár és a különböző konfigurációjú koaksziális Ge/Li detektorok kriosztátbani elhelyezési módozatait mutatja.

A Ge/Li detektort tartalmazó kriosztátot a 2.10 ábra vázlata szerinti elrendezésben kapcsoljuk a vákuumszivattyú rendszerhez, kb.  $5 \times 10^{-5}$  Hgmm elérése esetén a kriosztát rendszert hideg hegesztéssel lezárjuk.

A betokozott Ge/Li detektor lehűtését folyamatosan valósítjuk meg. Ennek időtartama néhány órát vesz igénybe. (5–10 óra). A lehűtésnél a tokban levő zeolit gázfelvevő képessége jelentősen megnő, így a vákuum 1–2 nagyságrendű növekedése érhető el.

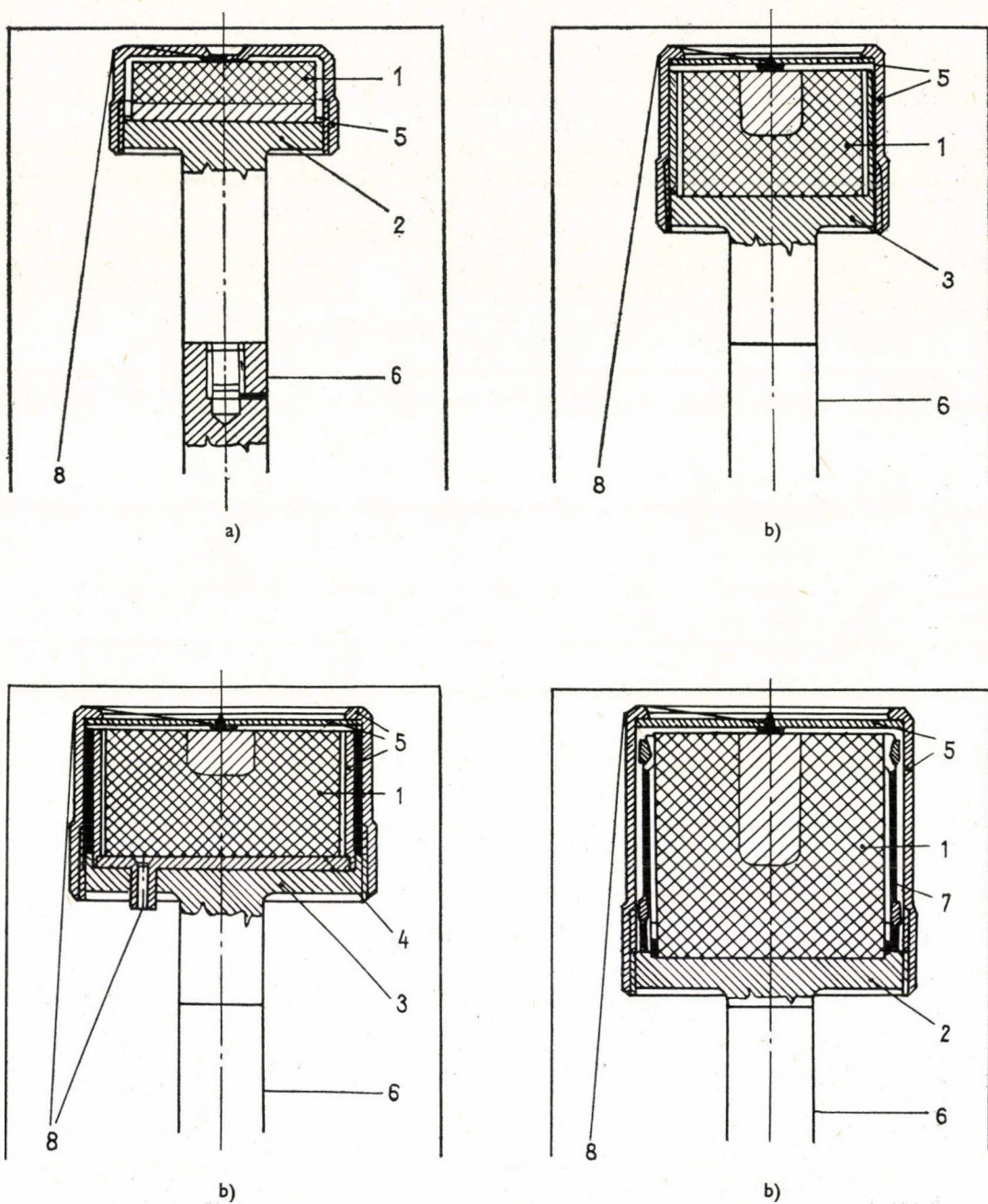
## 2.3. n-i-p struktúra kialakításával kapcsolatos vizsgálatok

### 2.3.1. Nagyhőmérsékletű drifteléssel kapcsolatos eredmények

Mint azt az első fejezetben bemutattuk, a teljes kompenzáció az n-p átmenet elektromos terében végbemenő Li-ion drift módszer felhasználásával valósítható meg.

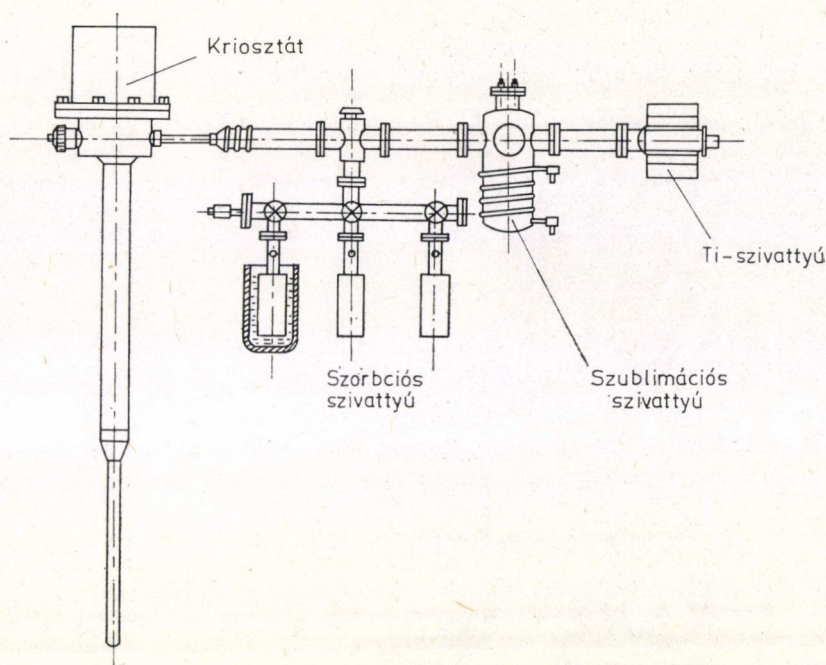
Nagy elektromos tér jelenlétében és megnövelt hőmérséklet esetén a Li-ionok a p-térfogatba vándorolnak, kompenzálva az akceptorok tértöltését. Ennek kapcsán





2.9. ábra. Planár (a) és koaxiális (b) típusú detektor tokozási vázlata: 1. detektor, 2. Al-tartó, 3. Al-tálka, 4.  $Al_2O_3$  alátét, 5. teflon, 6. hővezető, 7. Al árnyékoló, 8. kivezetés





2.10. ábra. Kriosztát vákuumszivattyú rendszer blokkvázlata

az elektromos tér átrendeződik. Minthogy az alkalmazott feszültség változatlan —  $U_d = \int \mathcal{E} dx = \text{const}$  — az ionok a  $p$  tartományba hatolnak, ezáltal az elektromos tér a kompenzált részben lecsökken. Túlkompenzáció az anyag egyes részein nem jöhet létre, mivel ez ellentétes polaritású tér fellépéséhez vezetne, amely viszont a túlkompenzált részt szétesztelná.

A Li  $p$  tartományba történő behatolás mértéke ( $W$ ) a mozgékonyásra vonatkozó összefüggésből számított nomogramok alapján határozható meg [66].

A gyakorlati szempontból szükséges aktív térfogat nagysága kapacitás mérésekből határozható meg elég nagy pontossággal [67]. A  $p$ - $n$  átmenet kapacitását a következő összefüggéssel definiáljuk:

$$C = \frac{dQ}{dU_D} \quad (2.18)$$

ahol  $Q$   $p$ - $n$  átmenetben tárolt összfeltöltés és  $U_D$  a detektorra kapcsolt feszültség. Gyakorlatilag használható összefüggésre a következő azonos átalakítás után juthatunk:

$$C = \frac{dQ}{dW} \frac{dW}{dU_D} \quad (2.18a)$$

ahol  $W$  a kiürített réteg vastagsága.

A  $Q$ ,  $W$  mennyiségeket a feszültség függvényében a Poisson egyenletből lehet meghatározni [68, 69].

$$\frac{1}{r^n} \frac{d}{dr} \left( r^n \frac{dU_D}{dr} \right) = -\frac{1}{\epsilon \epsilon_0} \varrho(r) \quad (2.19)$$



ahol  $r$  a távolsági koordináta,  $U_D$  a feszültség,  $q$  a térfogati töltéssűrűség,  $\varepsilon_0$  vákuum dielektromos állandója, továbbá  $n=0$  sík (planár) átmenetnél, míg cilindrikus esetben  $n=1$ .

Kompenzált térfogattal rendelkező diódákra, elegendően nagy feszültségre a következő megoldásokat kapjuk:

planár esetben

$$C = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{W} \text{ F/cm}^2. \quad (2.20)$$

koaxiális esetben

$$C = \frac{2\pi\varepsilon\varepsilon_0}{\ln\left(\frac{D}{d}\right)} \text{ F/cm}, \quad (2.21)$$

ahol  $D$  a kristály, illetve  $d$  a p-mag átmérője.

Ezek a közelítő feltételezések jogosak. Ugyanis jól kompenzált érzékeny térfogatokkal rendelkező diódánál 100 V körüli feszültségnél a dióda-kapacitás telítésbe megy, azaz a feszültségtől független lesz. Ezen a feszültségen azonban a töltéskigyűjtés rossz, ezért a diódákra ennél lényegesen nagyobb feszültséget kell kapcsolni a megfelelő felbontás elérésére. Igény jó közelítéssel azonosnak vehetjük a kompenzált réteget a kiürített réteggel.

Kapacitás mérés különösen a koaxiális konfiguráció esetén nehézségekbe ütközik. Ezért a vizsgálatok során a kapacitás és a térfogat meghatározását a fenti összefüggések figyelembevételével készített — 2.1, 2.2, 2.3 számú — nomogramokkal végeztük, a kiindulási és a színezéssel meghatározott geometriai adatok felhasználásával — mind a planár, mind a koaxiális konfiguráció esetén.

### 2.3.2. Clean-up vizsgálatok eredményei

A driftelés során az i-réteg növekedésével ( $W$ ) a minták rekombinációs áramát a következő összefüggés írja le: [70].

$$I_g = e \frac{n_i}{2\tau_i} W, \quad (2.22)$$

ahol  $n_i$  a szabad töltéshordozók koncentrációja;  $\tau_i = \sqrt{\tau_n \tau_p}$ ,  $\tau_n$ ,  $\tau_p$  az elektronok és lyukak élettartama.

A driftelés hőmérsékletén a tértöltési-tartományban nagy számú lyukelektronpár keletkezik, melyet az elektromos tér eltávolít. A lyukelektronpárok perturbálják az elektromos teret, töltéshordozó gradienst hozva létre:

$$\text{div } j_{p,n} = G \cdot e \quad (2.23)$$

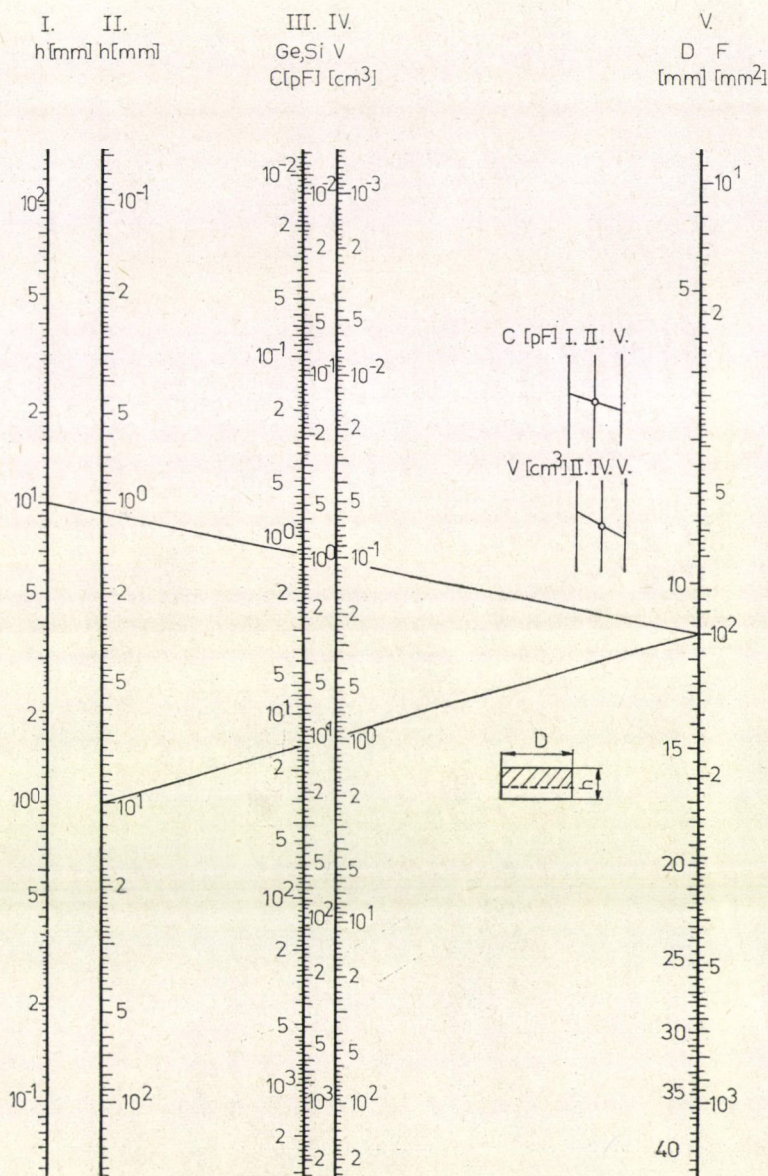
ahol  $j_{p,n}$  elektron és lyuk áram

$G = \frac{n_i}{2\tau_i}$  elektron és lyuk generáció sebessége,

ha  $x=0$ ;  $j_n=j$ ,  $j_p=0$ , illetve

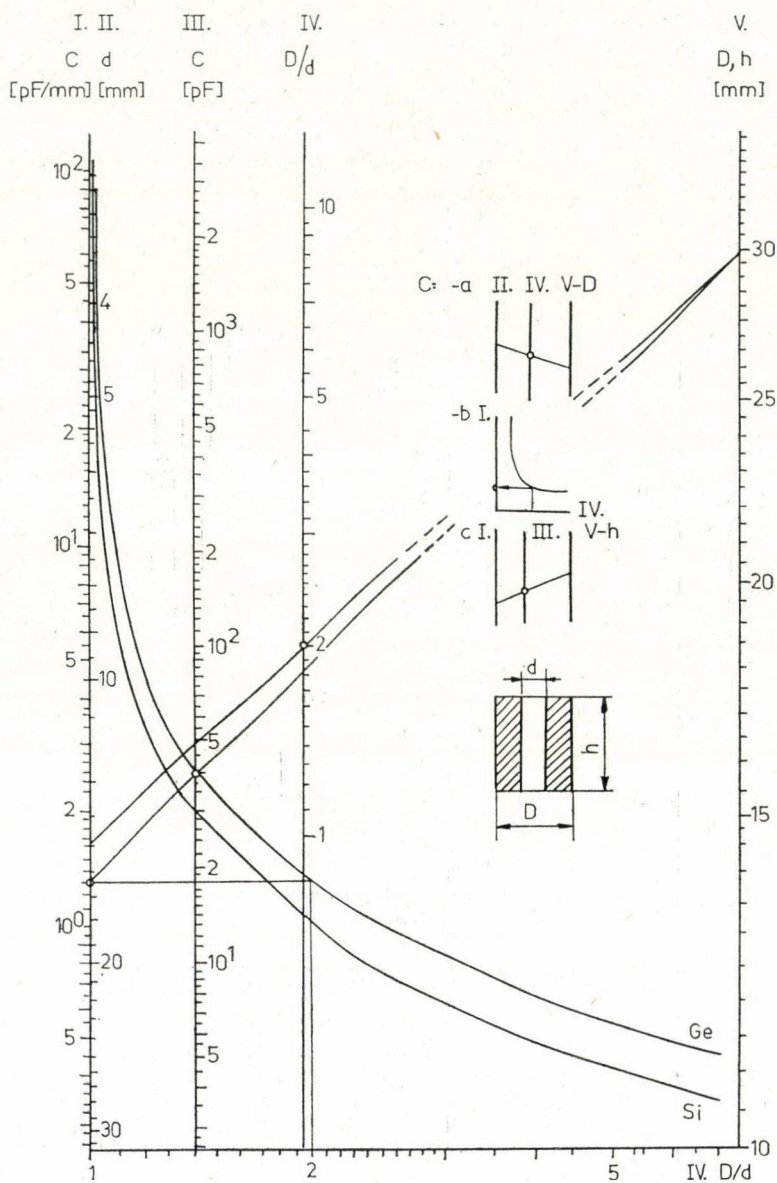
$x=W$ ;  $j_n=0$ ,  $j_p=j$ .



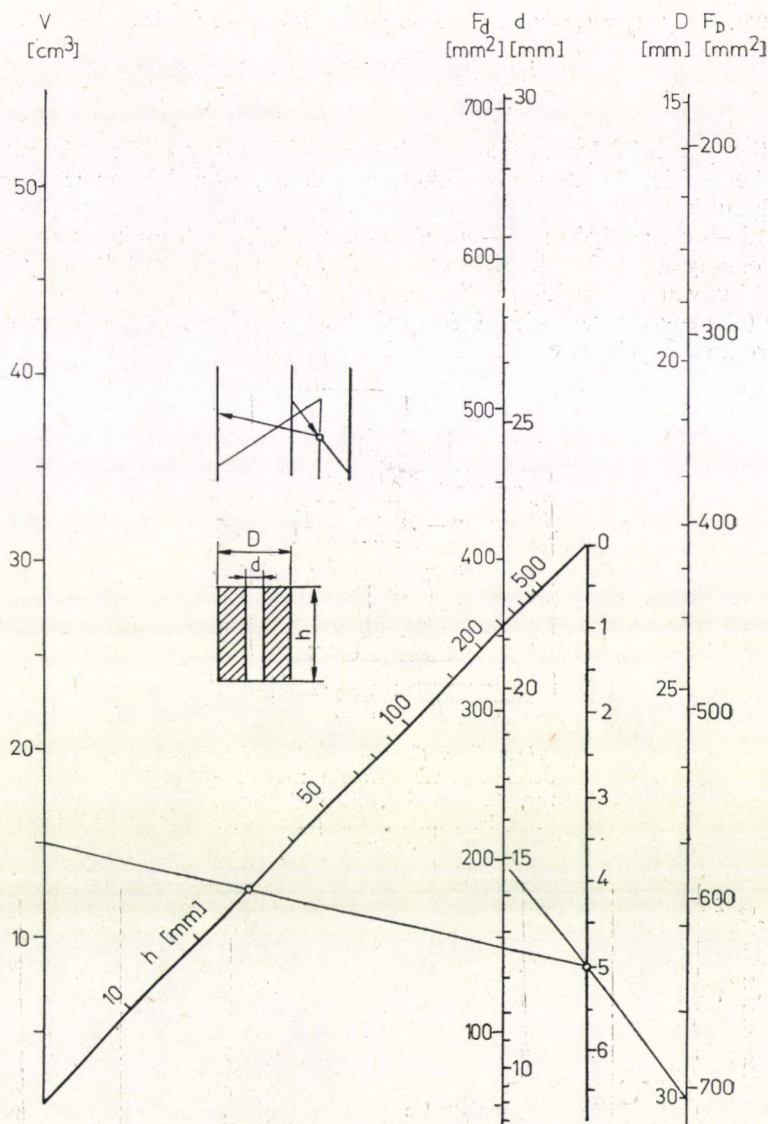


2.1. Nomogram a planár Ge/Li detektor kapacitásának és térfogatának meghatározásához





2.2. Nomogram a koaxiális konfigurációjú Ge/Li detektor kapacitásának meghatározásához



2.3. Nomogram a koaxiális konfigurációjú Ge/Li detektor térfogatának meghatározásához

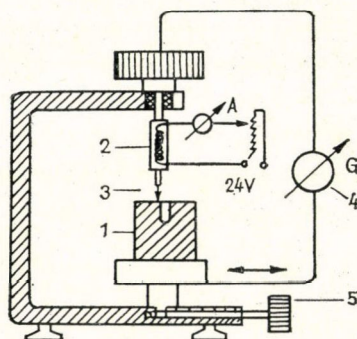


Feltételezve, hogy  $\mu_p = \mu_n = \mu$ , a (2.23) egyenlet integrálásával:

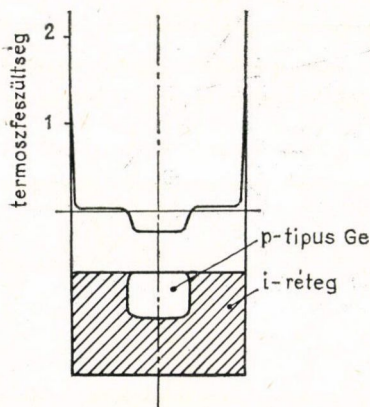
$$\frac{d(p-n)}{dx} = \frac{2GW}{\mu U_D} = \frac{n_i W}{\tau_i \mu U_D}. \quad (2.24)$$

Minthogy a driftfolyamatban teljes kompenzáció megy végbe, ezért a töltéshordozó gradienssel kapcsolatos töltés is kompenzálódik, így a drift hőmérsékletén saját vezetés alakul ki.

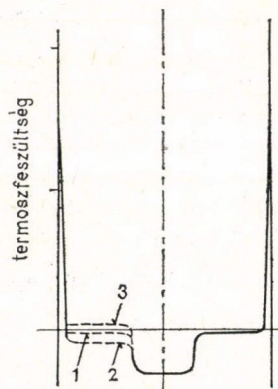
Üzemi — cseppfolyós  $N_2$  — hőmérsékletre történő lehűtésekor a töltéshordozó gradiens elhanyagolhatóan kicsi lesz (a záróirányú áram közel 10 nagyságrenddel lesz kisebb) ugyanakkor a Li-eloszlás a kompenzált tartományban fenn marad. Ezért az i-réteg ( $W$ ) egyik része p-típusúvá, a másik része n-típusúvá válik, ami nem kívánatos következményekhez vezet.



2.11.a ábra. Thermoszondás mérő berendezés blokk-vázlata: 1. detektor, 2. melegítő, 3. kollektortű, 4. galvanométer, 5. mikrométer csavar



2.11.b ábra. 12cm³ érzékeny térfogatú Ge/Li detektor thermoszondás felvétele



2.11.c ábra. Li-kompenzáció vizsgálata, thermoszondával



Ez egyrészt nagy visszaram növekedést okoz, mely jelentős felbontóképességre romlást idéz elő, másrészt nagy kapacitást eredményez: ami az i-tartomány töltéskigyűjtéséhez nagy üzemi feszültség alkalmazását teszi szükségessé. A kapacitás növekedés is felbontóképesség romláshoz vezet, mivel a Ge/Li detektorhoz kapcsolódó FET-bemenetű előerősítő slope-zaj járuléka jelentős lehet [71].

Ennek kiküszöbölésére a magas hőmérsékletű drift után kialakult Li-koncentráció-gradiens kisimítását kell megvalósítani, mely egyben a Ge/Li detektor felbontóképességének nagyfokú javulását is eredményezi.

A drifteléssel, illetve clean-up eljárással kompenzált germánium egykristály vizsgálata termoszonadás módszerrel történt [72]. A kompenzáció fokának és egyenletességének ellenőrzését a thermofeszültség mérésével végeztük. A mérés elrendezési vázlatát a 2.11.a. ábra szemlélteti. A 2.11.b. ábra mutatja egy 12 cm<sup>3</sup> érzékeny térfogatú Ge/Li detektor esetén kapott eredményt. Amennyiben a kompenzált rétegnél a thermofeszültség polaritása enyhén pozitív, úgy ez tökéletes kompenzációra enged következtetni. Az ilyen jellegű kompenzált réteggel rendelkező diódák jó felbontást nyújtottak.

A fenti vizsgálati módszer alkalmazásával néhány minta esetében a 2.11.c. ábrán látható eredményt kaptuk. Az 1. szakasz a Ge kristály driftelése során kapott kompenzált réteget mutatja. A további drifteléshez szükséges újabb lítium mennyiség felvitele után kapott mérési eredményt ezen ábra 2. görbéje mutatja.

Ezt az eredményt úgy lehet értelmezni, hogy a lítium diffúzióhoz szükséges hőmérsékletre történő újabb felmelegítés nem aktiválja a kompenzált rétegben a korábbiakban precipitált lítiumot. Ugyanis ekkor a 3. görbét kellene kapnunk a fellépő túlkompenzáció miatt.

A kísérletileg kapott 2. szakasz fellépéséből arra lehet következtetni, hogy újabb hőkezelés kristályhibákat eredményez, ami további lítium precipitációt von maga után. Az ilyen jelleget mutató anyagokból jó minőségű detektor nem volt készíthető.

### 2.3.3. Ge—Li-rendszer kísérleti vizsgálata

A germánium—lítium rendszer legfontosabb problémája a lítium szilárd oldatból történő kicsapódása [73]. A precipitációban igen jelentős szerepe van a kristályhibáknak, és az oldott oxigénnek. A kristályhibák előállhatnak a félvezető anyag felmelegítésénél. A kristályhibák és az oldott oxigén a lítiummal kölcsönhatásba lépve nukleációs centrumokat alkotnak, és ezek környezetében a lítium kicsapódik. A lítium-kicsapódás lokális inhomogenitást okoz a félvezető anyagban, amely az elektromos térerősség inhomogén eloszlásához vezet.

A donor, illetve akceptor koncentrációk változásakor fellépő elektromos tér a következő:

$$E = -\frac{kT}{q} \frac{1}{N} \text{ grad } N, \quad (2.25)$$

ahol  $k$  a Boltzmann állandó,  $T$  az abszolút hőmérséklet,  $q$  az elemi töltés,  $N$  a szennyező (adalek) anyag koncentrációja.

Az összefüggésből látható, hogy lokális adalekanyag koncentráció-változás lokális elektromos erőteret hoz létre. Végeredményben ez a sugárzás hatására kelet-

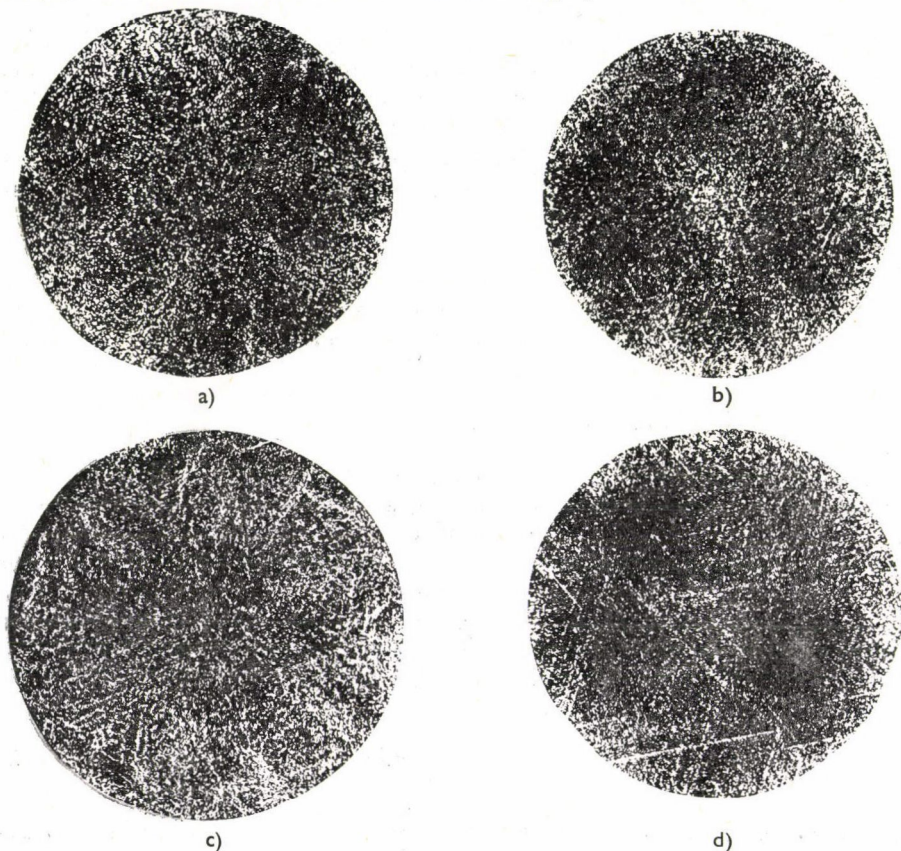


kezett töltéshordozók rossz hatásfokú begyűjtését és a detektor rossz felbontását eredményezi.

Kísérleteink során megállapítottuk, hogy záróirányú feszültséggel előidézett termikus sokk hatására a lehűtés után a detektor felbontóképessége jelentősen megjavult. Ez a jelenség úgy értelmezhető, hogy a nukleációs gócot a termikus sokk „szét-razza” és a jelenlevő erőter a lítium ionokat egyenletesen „elkeni”.

#### 2.3.4. Diszlokációk hatása

Az alapanyagban levő diszlokációk és azok eloszlása kihat a detektor minőségére. Inhomogén diszlokáció eloszlással rendelkező anyagokból általában csak gyenge felbontóképességű detektort sikerült készíteni: ilyenkor a detektorra kapcsolható feszültség is rendkívül alacsony volt. Valószínűleg a diszlokáció környezetében levő vakancia-felhő hatása érvényesül. Ezt a 2.1. táblázat adatai is alátámasztják. Hasonló eredményeket tartalmaz több irodalmi közlés is [74].



2.12. ábra. Germánium egykristály minták diszlokációs képe. Az a), b) felvétel detektor gyártásra alkalmas, a c), d) felvétel detektor gyártásra alkalmatlan egykristályt ábrázol



A fentieken túlmenően a vonal-diszlokációk jelenléte olyan mechanikai feszültség centrumokat jelentenek, amelyek a gyártási folyamatok közben kristályrepedéshez, töréshez vezethetnek.

A 2.12. ábrán látható 4 felvétel körül az a illetve b jelű detektorgyártásra alkalmas germánium egykristályt, míg a c illetve d jelű nagy diszlokációs sűrűségű, vonalhibás, detektor készítésre alkalmatlan egykristály mintát mutat.

### 2.3.5. A fajlagos ellenállás hatása

A fajlagos ellenállásra vonatkozó adatok nem tartalmazzák az adalék és egyéb szennyező anyagok arányát. A dopoló anyagként használt adalékanyagon kívül, a félvezető anyag előállítás során a visszamaradt szennyezők miatt, a kompenzáció foka ingadozhat.

A (2.19) összefüggésből látható, hogy ha a kiinduló anyagban vezetőképességi inhomogenitások vannak, akkor a drift folyamat eredményeként létrejövő kompenzált rétegben a kompenzáció foka ingadozik [75].

$$N_{\text{Li}} - N_{\text{A}} = \frac{\varepsilon_0 U_d g^2}{q(1+gx)^2 \ln(1+gW)}, \quad (2.26)$$

ahol  $W$  a kompenzált réteg vastagsága,  $U_d$  a driftelési feszültség,  $\varepsilon_0$  vákuum, illetve  $\varepsilon$  a félvezető dielektromos állandója, feltételezve, hogy az akceptor inhomogenitás lineáris lítium gradienst  $[g]$  eredményez. Fenti összefüggéssel a téreőrre a következőket kapjuk:

$$E = \frac{kT}{q} \frac{g}{1+gx}. \quad (2.27)$$

Ebből látható, hogy a belső terek csak igen kis  $g$  értékek mellett lesznek elhanyagolhatóak.  $g$  nagy értéke lokális belső elektromos erőterek fellépéséhez vezet, amelyek a detektor felbontását lerontják. Az ilyen inhomogenitások termikus-sokkal nem tűnethetők el.

## 2.4. A Ge/Li detektorok készítéséhez felhasznált germánium optikai és rekombinációs tulajdonságának vizsgálata

### 2.4.1. Germánium transmissziós vizsgálata

Gamma-spektrometriai detektor készítésére felhasználható germánium egykristály minőségének prognózisa jelenleg is az egyik legaktuálisabb probléma. Ezért szükségesnek tartottuk a különböző felbontóképességű Ge/Li detektorok germánium alapanyag mintáinak vizsgálatát. Irodalmi adatok szerint [76] összefüggést találtak a p típusú germánium infravörös tartományon belüli átbocsátóképessége és a belőle készített detektorok minősége között. Meghatározták továbbá, a Ge/Li detektorok energia felbontóképessége, a kisebbségi töltéshordozók élettartama, valamint az anyag homogenitása közötti összefüggést is, a detektor üzemi hőmérsékletén [77, 78]. Feltételezésünk szerint a germánium egykristály infravörös tartományon belüli ab-



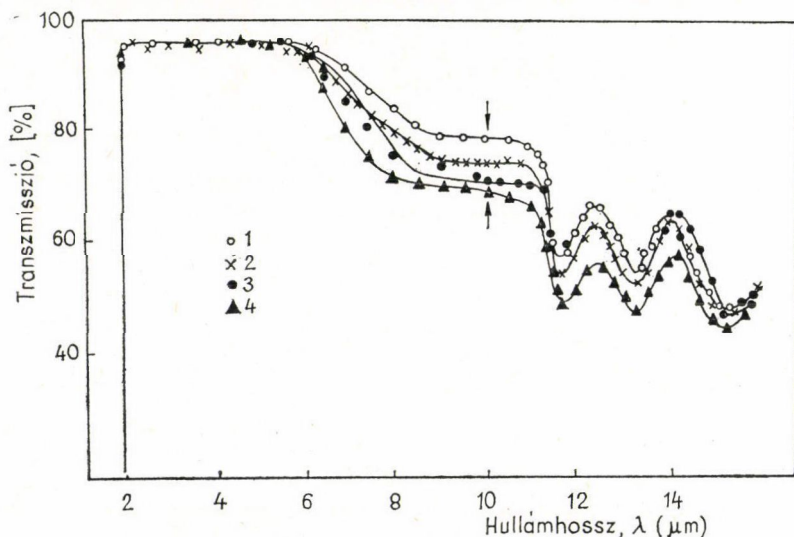
szorbcíójának és élettartamának 77 K hőmérsékleten történő egyidejű mérése lehetővé teszi az alapanyag és belőle készült Ge/Li detektor felbontóképessége közötti korrelációs kapcsolat létesítését.

Ebből a célból megvizsgáltuk a detektor készítésre felhasznált Ge egykristály élettartamának és infravörös tartományon belüli átbocsátóképességének hőmérséklet-függését. A kapott mérési eredményeket összehasonlítottuk ezen alapanyagokból készült detektorok energia felbontóképességével.

A transzmissziós spektrumokat IKSz-21 és UR-10 típusú infravörös spektrométereken vettük fel, 2—25  $\mu$  hullámhossz-tartományban.

A felületi oxigénkoncentráció, illetve a felülethibák transzmisszióra gyakorolt hatásának kiküszöbölése érdekében az összehasonlító ablakban vékony, körülbelül 500  $\mu$  vastagságú germánium mintát helyeztünk el. A kisebbségi töltéshordozók élettartamának hőmérséklet-függését, a 77 K—300 K közötti intervallumban [79, 80] a tranziens karakterisztika vizsgálatával végeztük. A  $\Delta n/p_0$  injektálási szint tartománya 0,1—10 közötti volt. A kisebbségi töltéshordozók élettartamának injektálási szintekre vonatkozó összefüggéséből meghatároztuk  $\tau_0$  értékét, s ábrázoltuk hőmérsékletfüggését.

A vizsgálatokhoz galliummal ötvözött, 18—36 ohm cm fajlagos ellenállású és  $2-4 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-2}$  diszlokációs sűrűségű, detektor készítésére alkalmas germánium egykristály mintát használtunk fel. A 2.2. pontban részletezett technológia szerint készült planár típusú detektorok energia felbontóképessége a  $^{137}\text{Cs}$  izotóp  $E_\gamma = 661,2 \text{ keV}$ -os  $\gamma$ -vonalára 2—20 keV közötti értékeket képviselt. Az infravörös spektrum mérését optikailag polírozott, 10,0 mm vastagságú planparel germánium mintákon végeztük. Élettartam mérésekhez, ugyanezek a minták lítium diffúzióval n-p átmeneteket készítettünk [79]. A 2.13 ábra különböző minták transzmisszióját ábrázoló görbe sorozatot mutat.

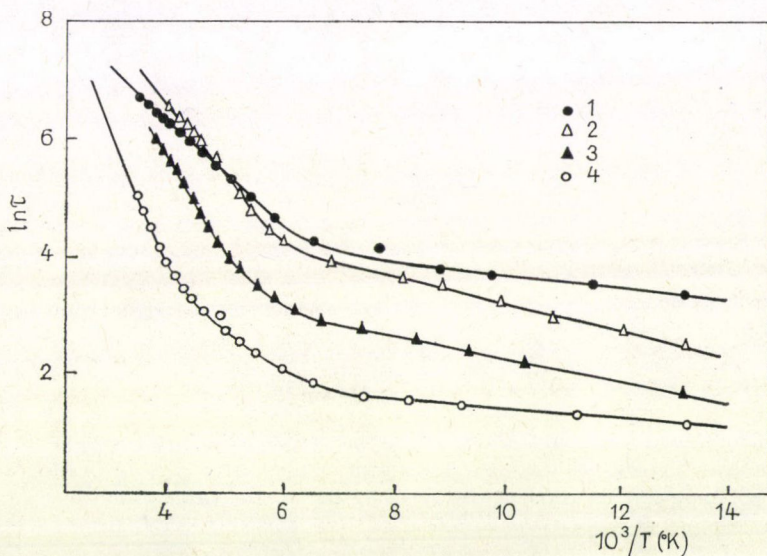


2.13. ábra. Ge/Li detektorok készítéséhez felhasznált germánium egykristály minták infravörös transzmissziós spektuma. (1—1, 2—3, 3—6, 4—7)



Az ábrából látható, hogy a  $2\text{--}6\text{ }\mu\text{m}$  spektrum-tartományban a vizsgált minták azonosan átlátszóak, mindössze  $6\text{ }\mu\text{m}$  felett figyelhető meg eltérés a különböző minták átbocsátóképességében, egészen  $11\text{ }\mu\text{m}$ -ig. A  $11,7\text{ }\mu\text{-os}$  hullámhosszon az oxigén-transzmissziós csúcs figyelhető meg. A  $13\text{--}25\text{ }\mu$  hullámhossz-tartományban észlelt maximumok a rácselnyelésnek felelnek meg [80, 81].

Az átbocsátóképesség vizsgálatánál az irodalomban megadott adatokhoz képest eltéréseket figyelhetünk meg [76]. Ezek az eltérések, valószínűleg azzal vannak összefüggésben, hogy a visszaverődést figyelmen kívül hagyták. A  $\tau$  paraméter hőmérséklet függését, néhány minta esetén a 2.14. ábra mutatja. Látható, hogy az effektív rekombinációs szint  $\Delta E_M$  különböző, s a vizsgált minták esetében  $0,04\text{ eV--}0,22\text{ eV}$  intervallumba esik [82, 83, 84].



2.14. ábra. Kisebbségi töltéshordozók élettartamának hőmérséklet függése különböző minták esetén. (1—3, 2—9, 3—8, 4—6)

#### 2.4.2. Kísérleti eredmények értelmezése

A mérések, illetve számítások eredményét a 2.2. táblázatba foglaltuk, amelyben a vizsgált Ge-alapanyag kiindulási paraméterein kívül feltüntettük az effektív rekombinációs szint ionizációjához szükséges energiaértékeket is. Az ionizációs energiákat az élettartam hőmérséklet függését egyrészt — az adott görbe exponenciális szakaszának iránytangense alapján, másrészt az alacsony hőmérsékletű plató és az exponenciális szakasz átmenetéhez tartozó hőmérséklet alapján határoztuk meg [85].

Egyetlen nívón keresztül végbemenő rekombináció esetén az ionizációs energiának mindkét esetben a mérés hibahatárán belül, azonosnak kell lennie. Ez csak az 1—3. minták esetében teljesül. Az esetek többségében azonban az élettartam hőmérséklet függvényében megfigyelhető változását, egyetlen nívón végbemenő rekombi-



nációval nem sikerül megmagyarázni. Ezen szintek természetének tisztázásához kiegészítő vizsgálatok szükségesek [86, 87].

A közölt irodalmi adatok alapján [76] jó felbontóképességű detektorokat nem sikerült előállítani olyan mintákból, amelyeknél a 6–11  $\mu$  hullámhossz-tartományban a transzmisszió csökkenése figyelhető meg.

Az általunk vizsgált valamennyi minta esetén a transzmisszió csökkenését figyelhetjük meg a fenti intervallumban.

## 2.2. TÁBLÁZAT

Ge/Li detektor felbontóképessége és a Ge-alapanyag abszorpciós tényezője, valamint a 77 K hőmérsékleten mért élettartama közötti összefüggés

Mintaszám	Élettartam, 77 K hőmérsékleten $\tau$ [ $\mu$ sec]	Effektív rekombinációs nívó ionizációs energiája [eV]		Elnyelési tényező, $\alpha$ [cm <sup>-1</sup> ]		Energiafelbontó- képesség $E_\gamma = 661,2$ keV [keV]
		íránytangens szerint	inflexiós pont hőmérséklete szerint	300 K	77 K	
1	27,0	0,221	0,202	0,139	0,097	2,0
2	28,0	0,220	0,205	0,145	0,10	2,0
3	40,0	0,053	0,140	0,17	0,124	2,5
4	23,5	0,053	0,143	0,09	0,05	2,5
5	30,0	0,045	0,145	0,17	0,11	3,0
6	3,3	0,201	0,198	0,216	0,184	20,0
7	15,0	0,086	0,153	—	—	5,0
8	6,0	0,156	0,177	—	—	15,0
9	20,0	0,097	0,145	0,223	0,199	18,0

Ennek ellenére ezekből az alapanyagokból mind jó, mind pedig rossz felbontóképességű detektorok készültek. Meg kell jegyezni, hogy valamennyi vizsgált minta esetében a 9–11  $\mu$ -os hullámhossztartományban az abszorpciós faktor jellege a  $\lambda$ -függvényében gyakorlatilag nem változott, azonban valamennyi vizsgált minta esetében az abszorpciós faktor nagyságára különböző értékeket kaptunk. Az abszorpciós faktorok transzmissziós görbékből meghatározott értékeit,  $\lambda = 10 \mu$  esetén, a 2.2. táblázat tartalmazza. A táblázatba foglalt összesített eredmények azt igazolják, hogy a detektor energia felbontóképessége és az alapanyagra vonatkozó mért elnyelési tényező, továbbá a 77 K hőmérsékleten mért élettartam között a korrelációs kapcsolat kielégítő.

Vizsgálataink eredménye alapján várható, hogy jó felbontóképességű detektorok  $\alpha_{\lambda=10\mu} \leq 0,12 \text{ cm}^{-1}$ , illetve  $\tau_{77\text{K}} \geq 20 \mu\text{sec}$  paraméterekkel jellemezhető alapanyagból készíthetők.

## 2.5. Ge/Li detektorok alkalmazástechnikai vizsgálatával kapott eredmények

### 2.5.1. A Ge/Li detektor üzemeltetési paramétereinek meghatározása

Ge/Li  $\gamma$ -spektrometriai detektorok üzemeltetési paramétereinek optimális beállítása érdekében szükséges a rendszer teljes nukleáris bemérése.

A szükségesnek ítélt főbb vizsgálatok a következők: üzemi feszültség kiválasztása, a mérőrendszer időállandó illesztése a detektorhoz, továbbá a felbontóképesség és linearitás vizsgálat [88, 89, 90].

Az alábbiakban egy koaxiális típusú Ge/Li detektoron mutatjuk be az elvégzett vizsgálatokat.

A vizsgálati eljárást reprezentáló Ge/Li detektor műszaki adatai:

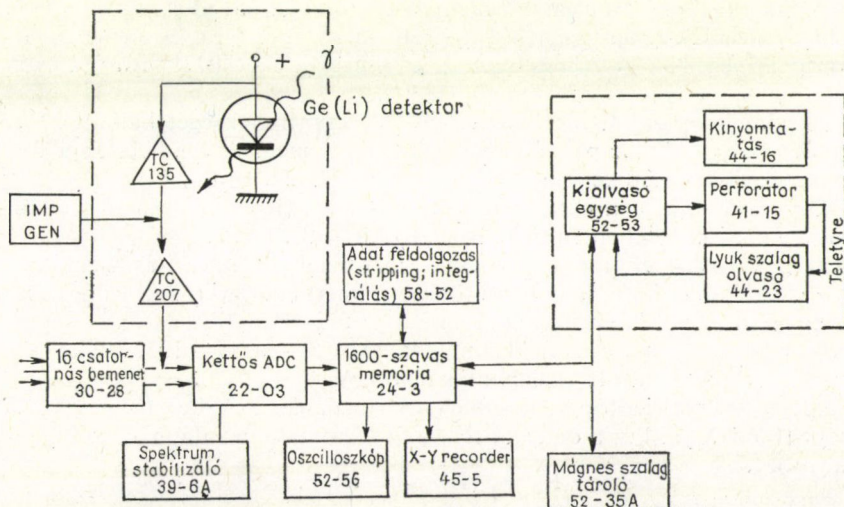
üzemeltetési hőmérséklet:	77 K
maximális üzemeltetési feszültség:	300 V
ajánlott üzemeltetési feszültség:	250 V
detektor feszültség polaritása:	negatív
érzékeny térfogat:	4 cm <sup>2</sup>

#### 2.5.1.1. Optimális üzemi feszültség meghatározása

Az optimális üzemi feszültség megállapítására — 0—325 V tápfeszültségtartományban — vizsgáltuk a detektor <sup>57</sup>Co 121,97 keV-es gamma vonalára vonatkoztatott energiafelbontását. A nukleáris bemérőrendszer blokkvázlatát a 2.15. ábra szemlélteti. A méréseknél használt időállandók:

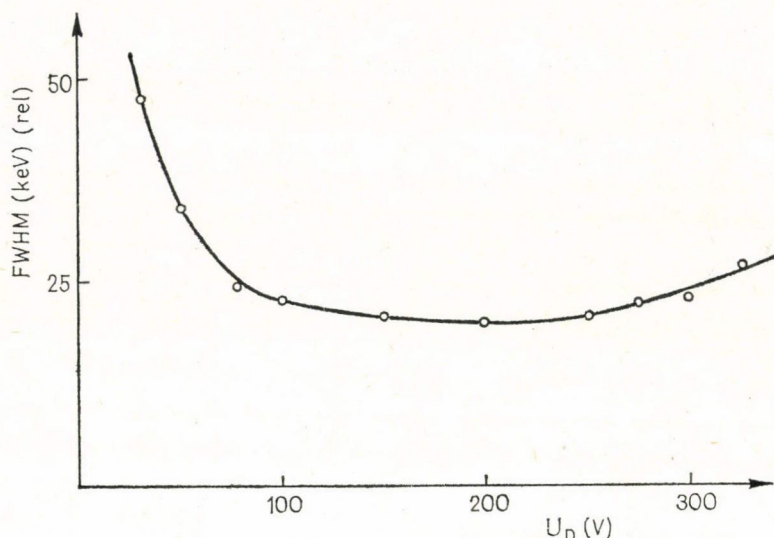
$$\tau_{d1} = \tau_i = 1,6 \mu\text{sec}; \quad \tau_{d2} = 6,4 \mu\text{sec}.$$

A mérési adatok alapján — 2.16. ábra — megállapítható, hogy a felbontás a 150—260 V tartományban csak kis mértékben függ a detektor tápfeszültségétől és optimális értéke 220 V körül van.



2.15. ábra. A nukleáris bemérés blokk vázlata





2.16. ábra. A Ge/Li detektor felbontása a tápfeszültség függvényében

### 2.5.1.2. Gamma-energia felbontóképesség meghatározása

A detektor energiafelbontását — optimális üzemi feszültségen — az alábbi gamma energiákra vonatkoztatva vizsgáltuk:  $^{60}\text{Co}$  1332,49 keV,  $^{137}\text{Cs}$  661,64 keV,  $^{57}\text{Co}$  121,97 keV.

A mérésekhez TC 135 M típusú, 50 mV/MeV érzékenyséű térvezérlésű tranzisztoros bemeneti fokozattal működő, töltéserzékes előerősítőt, TC 207 típusú lineáris előerősítőt, továbbá Nuclear Chicago 1600 csatornás, Model 24—3 típusú analízátort használtunk. A méréseket két differenciálási,  $\tau_{d1}$  és  $\tau_{d2}$ , és egy integrálási,  $\tau_i$  időállandóval végeztük. A zajmérésekhez szükséges jeleket BNC gyártmányú GL-2 típusú impulzus generátor szolgáltatta [91, 92].

A mérőrendszer zaját, illetve az előerősítő zajmeredekségét különböző értékű, a detektort helyettesítő kapacitásokkal határoztuk meg. A rendszer zaja 0 pF bemeneti kapacitásnál 1,70 keV, a zajmeredekség 0,023 keV/pF.

A kapott adatokkal a detektorra vonatkozó zaj ( $R_N$ ) az optimális feszültségen mért kapacitás ismeretében meghatározható:  $R_N = 3,79$  keV.

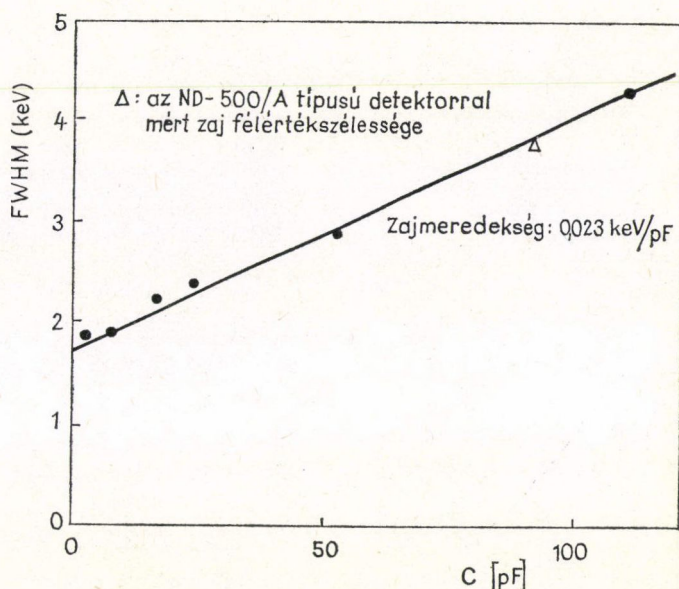
A felbontásmérések módját adnak a mérőrendszer linearitás vizsgálatára is. A  $^{60}\text{Co}$ ,  $^{22}\text{Na}$ ,  $^{54}\text{Mn}$  és  $^{137}\text{Cs}$  sugárforrások esetén mért ún. kevert spektrum és a mérés alapján meghatározott linearitási görbe a 2.18. ábrán látható.

Az ebből adódó csatornaértékkel meghatározott — a  $^{60}\text{Co}$  1332,49 keV-es gamma vonalára vonatkoztatott — felbontás 5,60 keV.

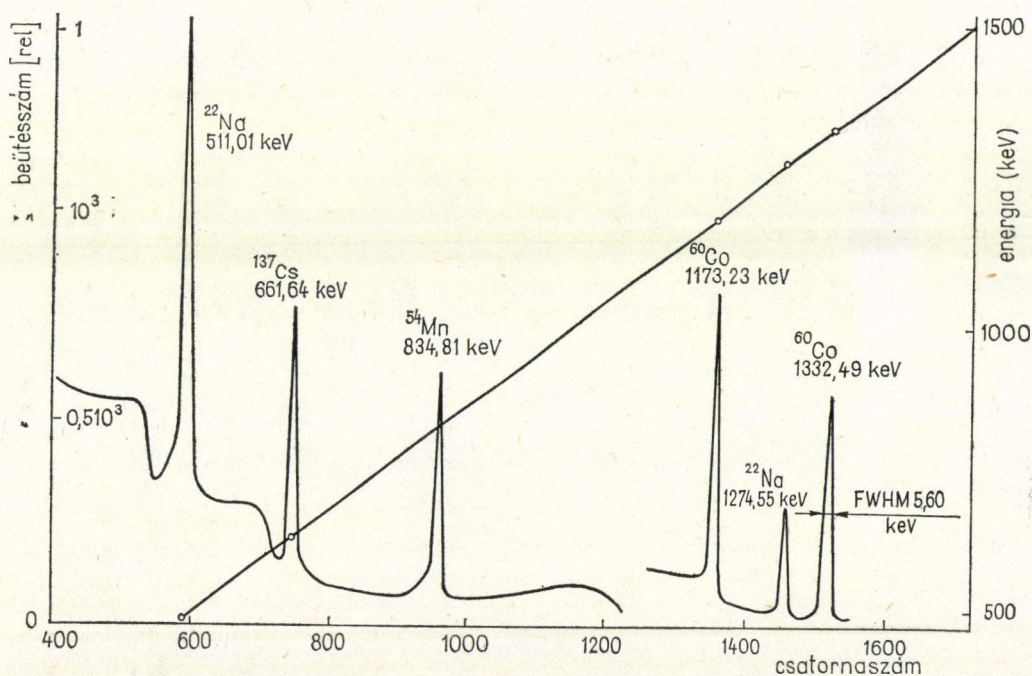
Ha  $R_{D+E}$  a  $^{60}\text{Co}$  izotóp 1332,49 keV-es vonalának keV-ben megadott félértékszélessége [FWHM] akkor a detektor  $R_D$  saját felbontása, az alábbi összefüggés alapján számítható:

$$R_D = \sqrt{(R_{D+E})^2 - (R_E)^2}.$$

Az 1332,49 keV-es gamma sugárzásra vonatkozó felbontást  $R_{D+E}$ -t, azonos módszerrel határoztuk meg. Több mérés átlagát véve a detektor saját felbontása:  $R_D = 3,9$  keV.



2.17. ábra. Előerősítő zajmeredekség meghatározása



2.18. ábra. Ge/Li detektor linearitás vizsgálata



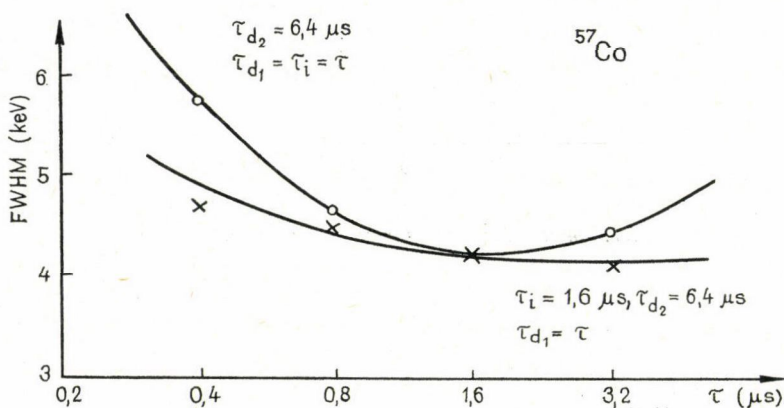
### 2.5.1.3. A detektor energiafelbontása a jelformálási időállandó függvényében

A mérés során a különböző időállandóknál meghatároztuk a  $^{57}\text{Co}$  121,97 keV-es gamma vonalára vonatkoztatott, keV-ben mért felbontásokat [93, 94].

A mérés elrendezése azonos volt a 2.5.1.1. pontban végzett vizsgálat blokkvázlatával.

Az első méréssorozatban  $\tau_{d1}$  és  $\tau_i$  azonos értékű volt. Az időállandó függvényében mért felbontás értékeket a 2.12. ábrán tüntettük fel. Amint látható az optimális időállandó  $\tau_{d1} = \tau_i = 1,6 \mu\text{s}$ .

A második mérés sorozatban  $\tau_i = 1,6 \mu\text{s}$ ,  $\tau_{d2} = 6,4 \mu\text{s}$  értékeket állandónak tartva  $\tau_{d1}$ -t 0,4 és 3,2  $\mu\text{s}$  között változtattuk. A fenti mérések alapján az optimális időállandó:  $\tau_{d1} = \tau_i = 1,6 \mu\text{s}$ ,  $\tau_{d2} = 6,4 \mu\text{s}$ .



2.19. ábra. A Ge/Li detektor felbontása a jelformálási időállandó függvényében

### 2.3. TÁBLÁZAT

Ge/Li detektorok  
energia-felbontóképességére  
kapott eredmények

Érzékeny térfogat ( $\text{cm}^3$ )	Detektor felbontóképessége* [keV]	
10	S**	3,5
	v***	2,5
20	s	4
	v	3,2
30	s	4,5
	v	3,5
40	s	5
	v	3,8

\*  $^{60}\text{Co}$  izotóp—1332,6 keV

$\gamma$ -vonalára

\*\* sorozat

\*\*\* válogatott

### 2.5.2. Kísérleti eredmények gyakorlati felhasználása

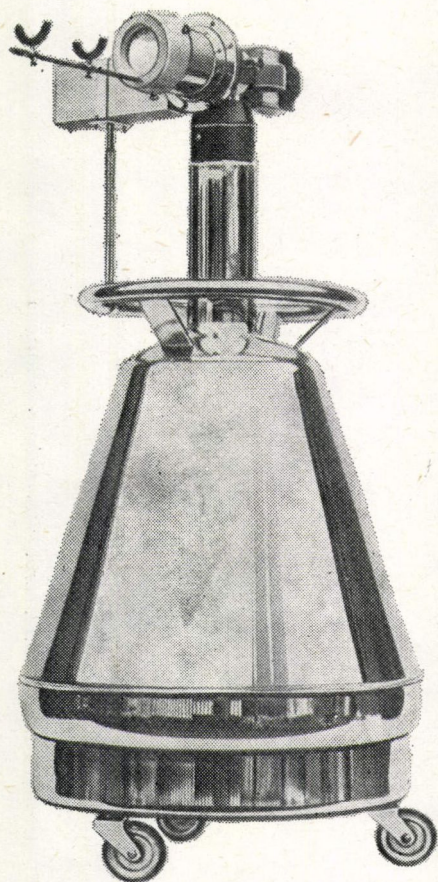
A 2.1—2.5 pontban ismertetett eljárások és vizsgálatok felhasználásával az EFKI-ben készült Ge/Li detektorok főbb paraméterei:

üzemi feszültség ( $U_D$ ) 500—2000 V  
 érzékeny térfogat 10—40  $\text{cm}^3$   
 érzékeny térfogatmélység 6—14 mm

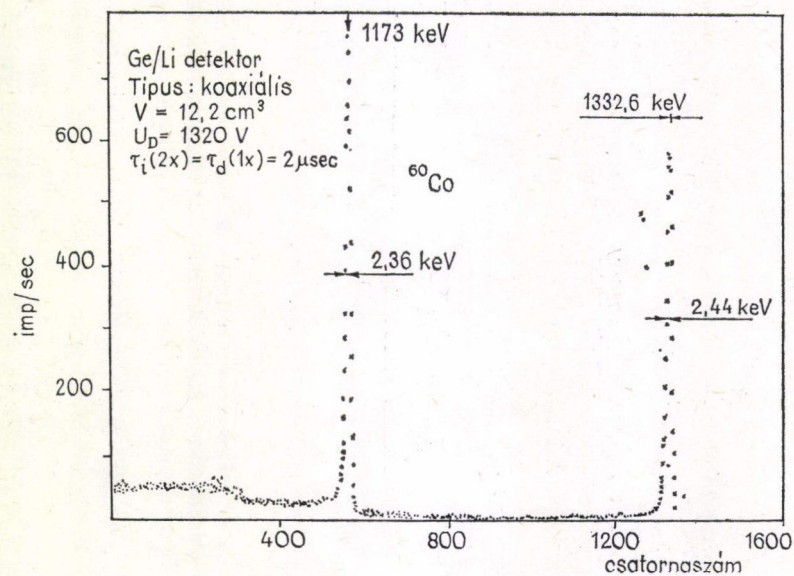
Az energia-felbontóképességre vonatkozó adatokat különböző térfogatú Ge/Li detektorok esetén a 2.3. táblázat foglalja össze.

Az általunk kifejlesztett Ge/Li detektort a 2.1. fotó szemlélteti

A 2.20, 2.21, 2.22 ábrák szemléltetik a válogatott típusú 12,2  $\text{cm}^3$  érzékeny térfogatú

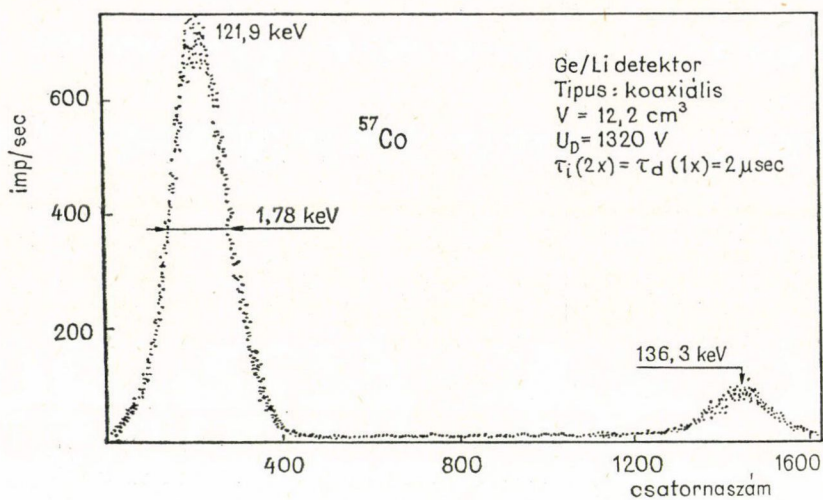
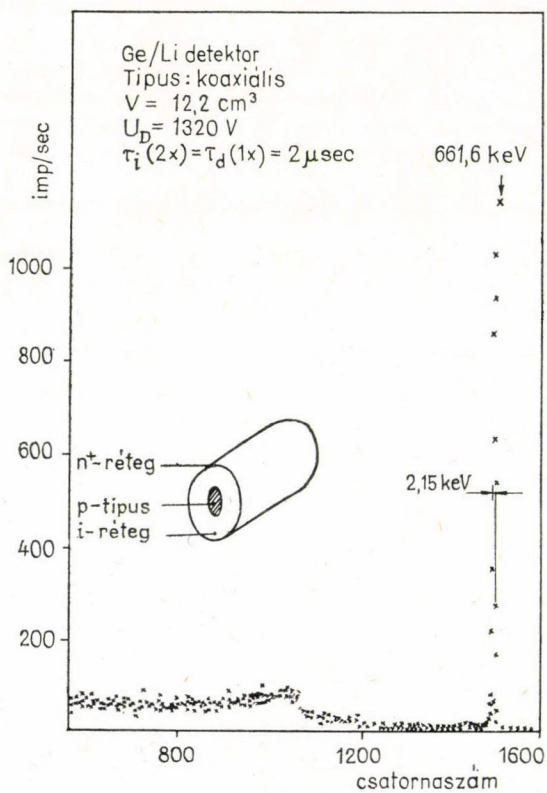


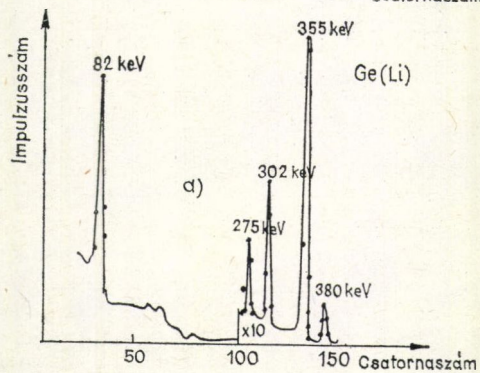
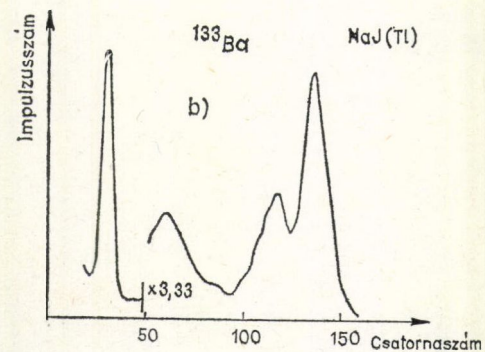
Ge/Li detektor rendszer



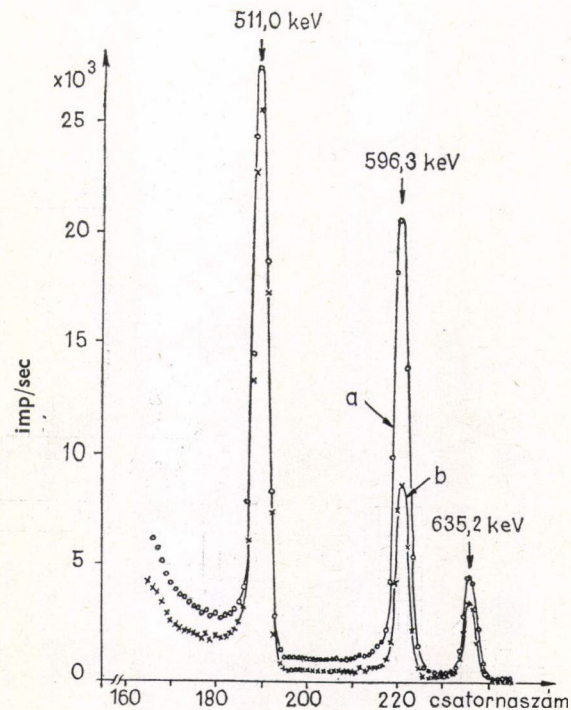
2.20. ábra.  $^{60}\text{Co}$  izotóp  $\gamma$ -spektruma



2.21. ábra.  $^{57}\text{Co}$  izotóp  $\gamma$ -spektruma2.22. ábra.  $^{137}\text{Cs}$  izotóp  $\gamma$ -spektruma

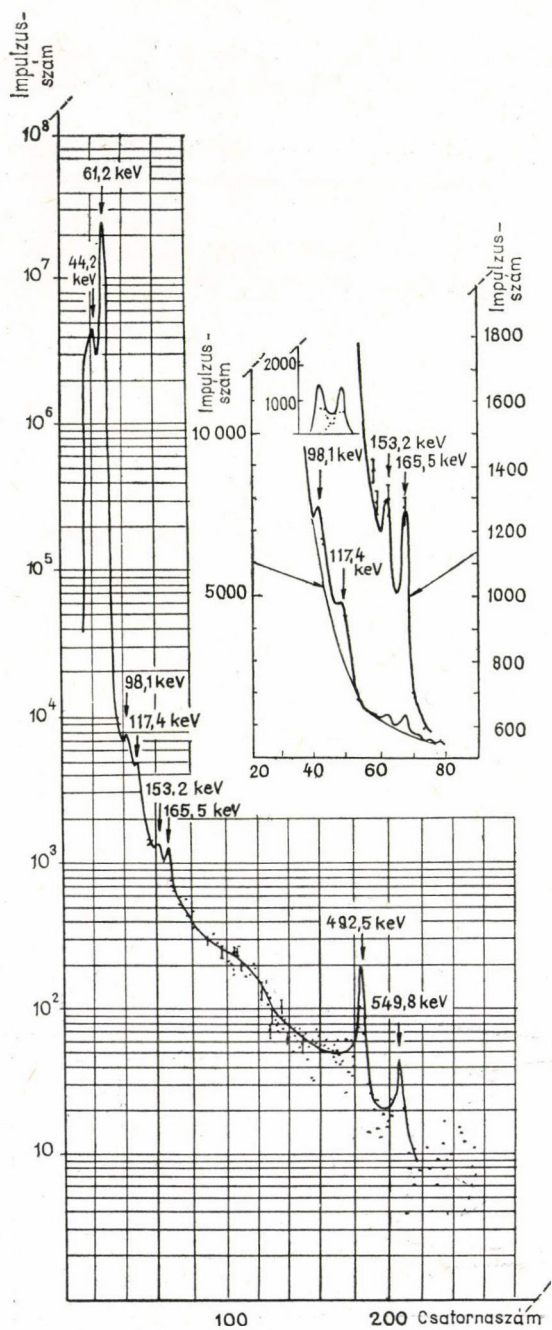


2.23. ábra.  $^{133}\text{Ba}$  szcintillációs és félvezető  $\gamma$ -spektruma

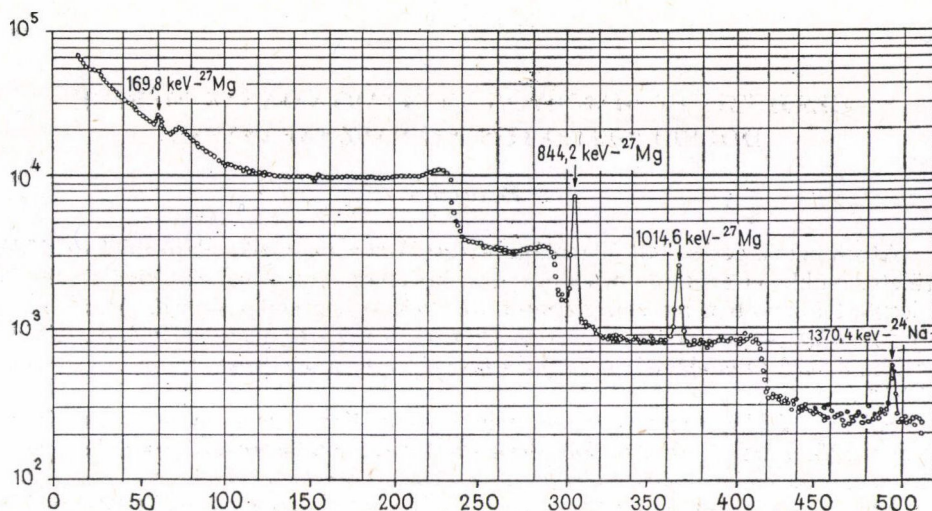


2.24. ábra.  $^{74}\text{As}$  koincidenca méréssel felvett  $\gamma$ -spektruma





2.25. ábra. A Ge/Li detektorral felvett  $^{145}\text{Sm}$   $\gamma$ -spektruma

2.26. ábra.  $^{27}\text{Mg}$  Ge/Li detektorral felvett  $\gamma$ -spektruma

Ge/Li detektorral kapott felbontás eredményeket.  $^{60}\text{Co}$ ,  $^{57}\text{Co}$  és  $^{137}\text{Cs}$  izotópok  $\gamma$ -vonalára [60].

Ge/Li detektorok alkalmazására bemutatunk néhány konkrét magfizikai mérés kapcsán kapott  $\gamma$ -spektrumot.

A 2.23. ábra izotóptisztasági vizsgálatok során felvett  $\gamma$ -spektrumot mutat  $^{133}\text{Ba}$  izotóp esetén. A b jelű ábra hasonló elrendezésben a NaJ(Tl)-al felvett spektrumot szemlélteti [6].

A 2.24. ábrán az  $^{74}\text{As}$  koincidenciával ill. anélkül felvett  $\gamma$ -spektrum látható. Ennek kapcsán vizsgáltuk a  $^{74}\text{Ge}$  első gerjesztett nivójára vonatkozó átmenet  $\alpha/\beta^+$  viszonyát [95].

A 2.25. ábra a  $^{145}\text{Sm}$  bomlásából eredő gamma-spektrumot mutatja. A már ismert gamma vonalakon kívül a Ge/Li detektor segítségével újabb vonalakat találtunk, melyek a bomlási séma tökéletesítését eredményezték [96].

A 2.26. ábra a Ge/Li detektorral felvett  $^{27}\text{Mg}$  gamma-spektrumát szemlélteti. Vizsgálataink során tanulmányoztuk a  $^{27}\text{Mg}$  bomlásakor emittált gamma-sugárzás energiáját és intenzitását. Ez lehetőséget adott az  $^{27}\text{Al}$  alacsonyabb nivóira vonatkozó adatok pontosítására [97].



## 3. FEJEZET

## GERJESZTETT MAGNÍVÓK ÉLETTARTAMÁNAK MÉRÉSE DOPPLER-EFFEKTUS FELHASZNÁLÁSÁVAL

### Bevezetés

Atommagok gerjesztett állapotának vizsgálata a magfizika alapvető érdeklődési területe. Nukleonok magon belüli mozgása következtében a magok többsége létezhet gerjesztett állapotban az alapállapotot meghaladó energiafelesleggel. Az atommag gerjesztett állapota a gerjesztési energián kívül jellemezhető még spinjével, paritásával, továbbá bomlási tulajdonságaival, mely magában foglalja az élettartamot és a bomlás módját [98].

Külön érdeklődésre tart számot a gerjesztett állapot élettartama — vagyis az a közepes időtartam —, amely után a gerjesztett mag alapállapotába bomlik le egy vagy több részecske emissziójával vagy gamma-sugárzás kibocsátásával.

Mag élettartamok ismeretéből, s a mag állapotok egyéb mérhető tulajdonságai-ból megkísérrelhető a magmodellek levezetése, illetve azok kísérleti alátámasztása [99].

A múltban a legfontosabb és közvetlen ellenőrzés, a magnívókkal kapcsolatos átmenetek tulajdonságainak mérésén, vizsgálatán keresztül valósult meg. Ez kidom-borítja a magnívók élettartammérésének fontosságát. A magnívók élettartamának mérésére szolgáló, leggyakrabban használt módszereket a 3.1. táblázat foglalja össze [100].

### 3.1. TÁBLÁZAT

Magnívók élettartam mérésére szolgáló alapvető módszerek

Mérési mód	$\tau$ közepes élettartam mérési tartománya [sec]
Késleltetett koincidencia Magvisszalökéses módszer (Recoil Distance — RD)	$\tau \approx 5 \cdot 10^{-10}$ $10^{-10} \approx \tau \approx 5 \cdot 10^{-12}$
Doppler eltolódás gyengülésén alapuló módszer (Doppler Shift Attenuation — DSA)	$10^{-11} \approx \tau \approx 5 \cdot 10^{-15}$ $10^{-14} > \tau > 10^{-16}$
Neutron rezonancia mérése Rádiófrekvenciás módszer	$\tau \sim 10^{-11} - 10^{-12}$

Az általános technológiai fejlődés a fenti módszereket tovább tökéletesítette, azonban forradalmi változást csak a nagy felbontóképességű Ge/Li detektorok ki-fejlesztése hozott a Doppler-effektus felhasználásán alapuló élettartam mérés terüle-tén — különösképpen a recoil-distance (RD) módszer alkalmazásával, mely az eddigi módszerekkel nem mérhető  $10^{-10} - 10^{-12}$  sec időintervallumot fedi le [101].

Doppler-effektus elvét hasznosító mérési módszer az 1950-es évek elején került ki-dolgozásra: a DSA módszer azonban nehézkesnek bizonyult, s elsősorban a  $10^{-12}$  sec-nél rövidebb magnívó élettartamok mérésére szolgál [102].



A DSA módszerrel végzett első vizsgálatokat követően a nehéz ionokkal létrehozott nagy impulzusmomentumú reakciók előnyei egyre inkább nyilvánvalóbbá lettek, s lehetővé tették a magok új osztályának vizsgálatát [103].

Az általunk kifejlesztett nagyfelbontóképességű Ge/Li detektor alkalmazásával lehetőség nyílt a Doppler-effektus felhasználásán alapuló RD-módszerrel történő élettartam mérésére [104]. E módszer az elektronikus időmérés és a DSA-val történő mérési módszer közötti gap-et hidalja át  $\tau = 10^{-10}$ – $10^{-12}$  sec tartományával.

A továbbiakban csak a két módszer elvét, azok alkalmazási területeit, s az eddig kapott eredményeket tekintjük át. Részletesen tárgyaljuk az általunk alkalmazott RD módszert; összefoglaljuk a kapott kísérleti eredményeket, amelyek hozzájárulnak az atommag szerkezetének további megismeréséhez.

### 3.1. Doppler-effektus magfizikai felhasználása

Doppler-effektus elve a mozgó forrás által emittált elektromágneses sugárzásra is alkalmazható; a frekvencia, s következésképpen az energia is különbözni fog a nyugalmi állapotban mérhető értéktől. Atommagok gerjesztett nívóinak lebomlása-kor emittált gamma-sugárzás ennek megfelelően Doppler eltolódást szenved, feltéve, hogy a lebomló mag mozgásban van a megfigyelőhöz képest [105].

Tételezzük fel, hogy a mag, amely  $v(t)$  sebességgel mozog, mozgási irányához képest  $\Theta$  szögben gamma-sugárzást bocsát ki (3.1. ábra). A  $\Theta$  szög alatt megfigyelhető  $\gamma$  sugárzás  $E_\gamma$  energiája — a nyugalmi állapotba lebomló mag által kibocsátott  $\gamma$ -sugárzás  $E_{\gamma_0}$  energiájához viszonyítva — a következő összefüggéssel írható le:

$$E_\gamma = E_{\gamma_0} \left[ 1 + \frac{v(t)}{c} \cos \Theta \right] \quad (3.1)$$

ahol  $c$  — az elektromágneses sugárzás terjedési sebessége.

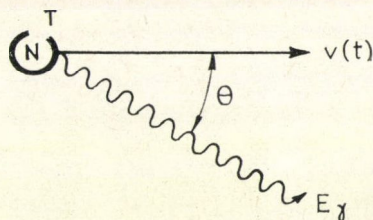
A két gamma-sugárzás energiája közötti különbség — vagyis a Doppler eltolódás:

$$\Delta E = \frac{v(t)}{c} E_{\gamma_0} \cos \Theta. \quad (3.2)$$

A Doppler eltolódás méréséből megkapjuk a sebességgel való kapcsolatot, s következésképpen a  $\gamma$ -kvantum kibocsátásának időpontját — feltételezve, hogy  $v(t)$  változása az élettartam skálában nem jelentős.

Élettartamnak a sebességgel történő összehasonlítási módja közös jellemzője az összes, Doppler-effektus alapján végzett élettartam mérési módszernek.

A továbbiakban áttekintjük a Doppler-effektus elvén alapuló  $\tau$  mérési eljárásokat; foglalkozunk a DSA- és RD-módszer alkalmazhatóságával.



3.1. ábra.



### 3.1.1. Doppler eltolódás gyengítésének módszere

A Doppler eltolódás attenuációs módszerének (DSA) kifejlesztése, alkalmazása Devons úttörő munkásságának eredménye [106]. A Ge/Li detektor kifejlesztésével, a DSA-módszerrel végezhető mag élettartam mérések leegyszerűsödtek: e detektor megjelenéséig csak néhány speciális esetben voltak megvalósíthatók.

DSA módszerrel végzett méréseknél az élettartam a visszalökött gerjesztett magok lefékeződéséhez szükséges idők összehasonlításából határozható meg. A fékezési idő szilárdtestben  $5 \cdot 10^{-13}$  sec, illetve  $5 \cdot 10^{-10}$  sec gáz-közegben: ennek megfelelően szilárdtest lassító közeg alkalmazása  $10^{-10}$ – $5 \cdot 10^{-15}$  sec, míg gáz lassító közeg felhasználása  $10^{-8}$ – $0,5 \cdot 10^{-12}$  sec intervallumba eső élettartam méréseket tesz lehetővé [107, 108]. A DSA-módszer alapegyenlete a (3.1) alatti összefüggés.

Gyakorlatban a módszer két változata használatos [109]. Az első esetben két különböző irányba emittált gamma-sugárzás energiakülönbségét mérjük egyazon fékező anyag esetén. A másik módszer szerint a különböző anyagokban lefékeződő visszalökött magok energiakülönbségét mérjük. Ebben az esetben a megfigyelési szög változatlan.

Mindkét esetben az élettartam a gamma energia megfigyelt eltolódásából számolható. A fékezési időhöz képest hosszabb élettartamokra az első, míg rövidebb élettartamok esetén a második variáns ad pontosabb eredményt.

#### 3.1.1.1. DSA eljárás alapjai

Vizsgáljunk meg  $N_0$  számú gerjesztett magokból álló együttest  $t=0$  időben. Tételezzük fel továbbá, hogy ezen magok kezdeti sebessége  $v_0$  — melynek nagysága és iránya jól meghatározott — és  $\tau$  közepes élettartammal bomlanak le  $E_0$  energiájú gamma-sugárzás kibocsátásával [110, 111].

$$N(t) = N_0 \exp(-t/\tau). \quad (3.3)$$

A bomlás sebességét a magok lefékeződése esetén a fenti egyenlet differenciálásával határozhatjuk meg:

$$\frac{dN(t)}{dt} = -\frac{N_0}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (3.4)$$

ahol  $N(t)$  a  $t$  időig el nem bomlott magok száma.

Amennyiben a magok kezdeti mozgásiránya lelassulásuk során megmarad, úgy a közepes Doppler eltolódást megkapjuk, ha a  $t$  és  $(t+dt)$  közötti intervallumban a (3.3) összefüggéssel meghatározott lebomló anyagok számát megszorozzuk a (3.2) egyenletnek megfelelő Doppler eltolódással, s ezt összegezzük az egész időintervallumra.

Az így kapott eredmény:

$$E = \frac{E_0 \cos \Theta}{c\tau} \int_0^\infty v(t) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) dt. \quad (3.5)$$



A (3.5) egyenlet egyszerűbb formáját nyerjük, ha a közepes eltolódást a  $v(t)=v_0$  sebességnél lebomló magokra vonatkozó maximális eltolódáshoz viszonyítjuk: ezt a hányadost gyengítési faktornak nevezik, s értékét a következő összefüggés adja meg:

$$F(\tau) \frac{\bar{v}}{v_0} = \frac{1}{v_0 \tau} \int_0^{\infty} v(t) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) dt. \quad (3.6)$$

Fenti egyenlet a mért Doppler eltolódás és a mag közepes élettartama közötti kapcsolatot adja meg, ha ismerjük a visszalökött mag sebességét, a fékezési idő függvényében.

A (3.6) egyenlet jelenlegi formájában a gyakorlatban nem mindig használható fel a kezdeti sebességeloszlásra, és azt követő fékezési folyamatra vonatkozó korlátozó feltételek miatt. Kísérleti megvalósítás során nem számolhatunk monoenergetikus, azonos mozgás irányú gerjesztett magok nyalábjával, így az  $F(\tau)$ -ra vonatkozó összefüggést módosítani kell a kezdő sebességekre vonatkozó közepeléssel. Az a feltételezés, hogy a magok lefékeződésük során egyenes vonal mentén mozognak, csak nagy sebességeknél érvényes: ezért további korrekció szükséges, amely a fékező-anyagban mozgó ion energia-veszteségi mechanizmusának részletesebb tanulmányozásából nyerhető [112].

### 3.1.1.2. DSA-módszer kísérleti eredményei

Élettartam meghatározásra a DSA eljárásnak számos kísérleti változata létezik, a gyakorlatban azonban csak két módszer terjedt el.

Az első esetben két különböző szög alatt megfigyelt gamma-sugárzás közepes energiájának, illetve a mért gamma-energiaeloszlás centroidjának eltolódását kell meghatározni, majd ezeket viszonyítani a lehetséges maximális eltolódáshoz (centroid eltolódás analízis) [113].

A második változatban a gamma sugárzás megfigyelését csak egy adott szög alatt végezzük, s összehasonlítjuk a különböző szilárdtestekbeni lefékeződéseket, illetve a vákuumra kapott gamma spektrumokat (spektrum-alak analízis) [114].

A továbbiakban röviden kitérünk a DSA eljárással kapott fontosabb eredményekre, a kísérleti technikára, a módszer korlátaira, s a Ge/Li detektor alkalmazásával megvalósítható új vizsgálati területre, centroid eltolódás analízise esetén.

A centroid analízis NaJ(Tl) detektorral végzett klasszikus példái az  $^{18}\text{O}$  és  $^{18}\text{F}$  gerjesztett állapotainak vizsgálata [115].

A

$T(^{18}\text{O}, p)^{18}\text{O}$

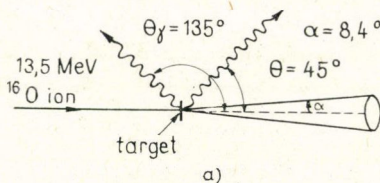
$T(^{18}\text{O}, n)^{18}\text{F}$

reakciókkal létrehozott monoenergetikus nyaláb nagy visszalökési sebessége következtében ideális a Doppler eltolódás mérésére. A kísérlet vázlatát, s az  $^{18}\text{O}$ -ra kapott  $\gamma$ -spektrumot a 3.2. ábra mutatja. A megfigyelt 22 keV-s eltolódásból számított élettartam 3,7 psec-nek adódott [116].

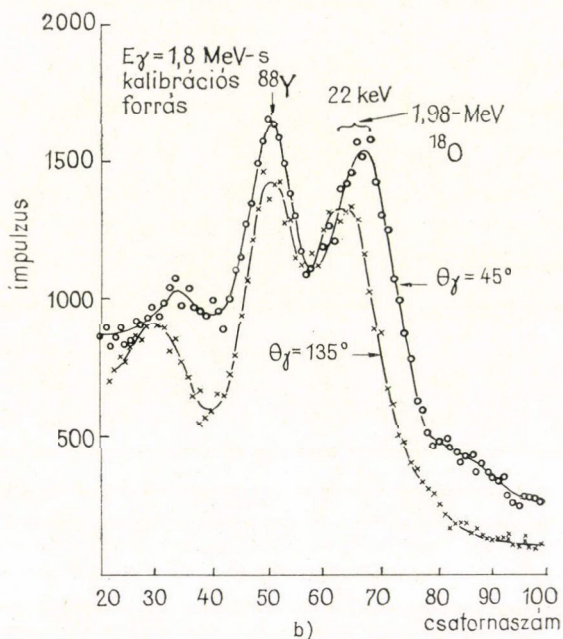
Ge/Li detektorok használata nagyságrenddel kisebb eltolódásokat tesz lehetővé. A mérések kisebb visszalökődési sebességek esetén is elvégezhetők, s kis energiájú gyorsítókkal nehéz magok vizsgálata is megvalósítható.



Ge/Li detektorral végzett mérésre a 3.3.a, b, c ábrák a  $^{40}\text{Ca}$  nívóinak élettartam meghatározását mutatják be. A 3.3.a ábra a mérés kísérleti elrendezését szemlélteti. A protonokkal koincidenciában levő  $\gamma$ -sugárzást két különböző szög ( $45^\circ$ , illetve  $135^\circ$ ) alatt mérjük [117].



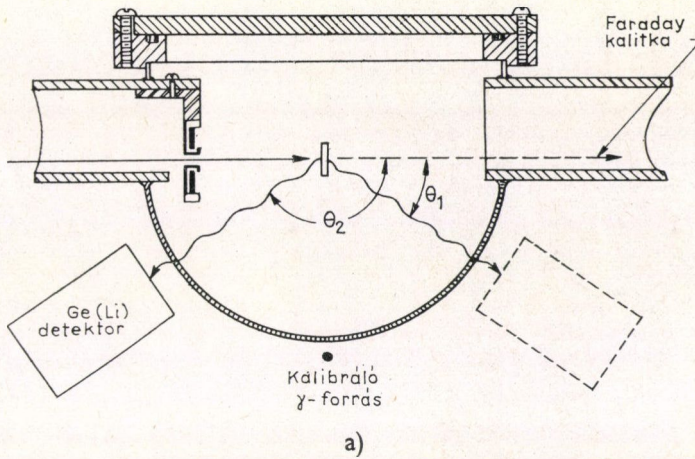
3.2.a. ábra.  $^{18}\text{O}$  gerjesztett mag élettartam mérésének kísérleti geometriája



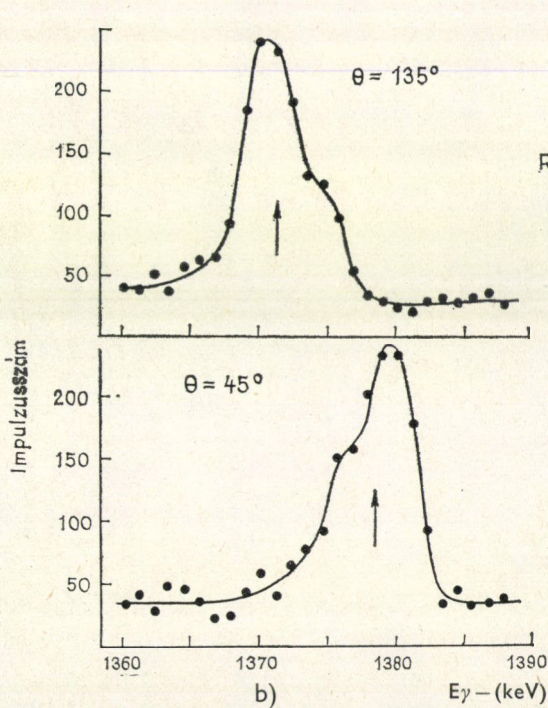
3.2.b. ábra. Doppler eltolódást szenvedett  $\gamma$ -spektrum  $^{18}\text{O}$  esetén

A 3.3.b ábra mutatja a  $^{40}\text{Ca}$  5,28 MeV-s nívójáról jövő, a gerjesztő protonokkal koincidenciában levő  $\gamma$ -spektrumot. A megfigyelt nívó 1,37 MeV-os  $\gamma$ -kvantum kibocsátásával bomlik le. A megfigyelt  $7,15 \pm 0,35$  keV-os eltolódás  $0,65 \pm 0,03$  gyengítési faktornak felel meg — 3.3.c ábra —, mely  $(3,3 \pm 0,4) \cdot 10^{-13}$  sec élettartamot eredményez.

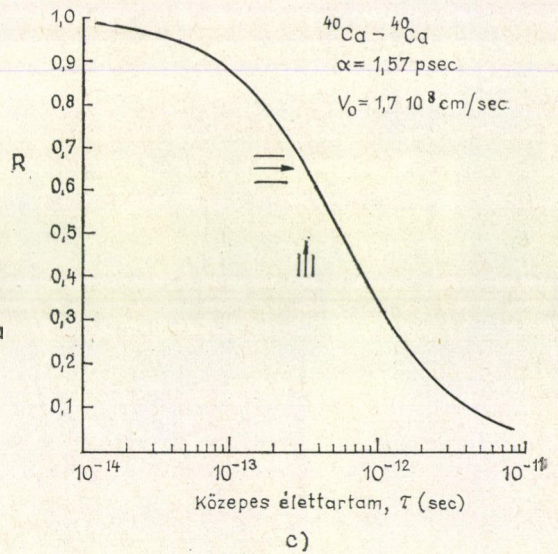




3.3.a. ábra. Rugalmatlan szóródás kapcsán gerjesztett magnívók élettartam mérésének kísérleti elrendezése



3.3.b. ábra.  $^{40}\text{Ca}$  Doppler eltolódást szenvedett  $\gamma$ -spektruma



3.3.c. ábra. Közepes élettartam gyengülési faktora



DSA módszerrel végzett spektrum alak-mérések pontosságát alapvetően korlátozza a nehéz ionok szilárdtestbeni energiavesztésére, illetve szóródására vonatkozó pontos ismeret hiánya. A korlátozás  $\sim 10\%$ -os, függetlenül attól, hogy milyen pontosan és gondosan végezzük méréseinket.

### 3.1.2. Recoil-distance módszer

Nagyfelbontóképességű Li-driftelt germánium detektorok kifejlesztésével lehetőség nyílt a gerjesztett magnívók élettartamának  $10^{-10}$ – $10^{-12}$  sec tartományban történő mérésére is, amely eddig a magfizika kevésbé tanulmányozott területe volt. Hasonlóképpen lényeges elemnek tekinthető a nehéz ionok felhasználása magreakciók létrehozására [118, 119].

Nehéz ionokkal létrehozott reakciókban a Doppler eltolódás a Ge/Li detektor felbontásához képest nagy lesz, így megvalósítható a visszalökés után nyugalomba került és a mozgó mag által emittált gamma-sugárzás tökéletes szétválasztása. A kapott gamma-spektrumok alapján lehetővé válik, a  $10^{-10}$ – $10^{-12}$  sec intervallumba eső élettartam mérése igen nehéz magok esetén is [120].

Korábbi kísérletekben, ahol a protonok által létrehozott magreakciókból származó gamma-sugárzást figyelték meg,  $v/c$  értéke  $\sim 10\%$  volt, így a kapott Doppler eltolódás kisebb, mint a gamma detektálására használt NaJ (Tl) szcintillációs számláló energiafelbontása ( $\sim 5$ – $10\%$ ). A  $v/c$  kis értékei miatt, a visszalökött gerjesztett magok eloszlásának meghatározásához mikron és tört részeit kitevő távolságok mérése vált szükségessé [121].

Ismert, hogy nehéz ionok fémekben történő lefékeződési ideje  $3 \cdot 10^{-13}$  sec; a DSA módszer ezt, mint időskálát használja fel a  $10^{-14}$ – $10^{-12}$  sec tartományba eső magélettartamok mérésénél [122].  $5 \cdot 10^{-12}$  sec-nél nagyobb élettartamok esetén a Doppler eltolódás olyan mértékben gyengül, hogy pontos mérés elvégzése nem lehetséges. Amennyiben az élettartam  $\tau \gg 10^{-12}$  sec és a visszalökési sebesség  $v/c \sim 5\%$ , úgy az  $1,5 \cdot 10^{-3}$  cm-s közepes úthossz — melyet a gerjesztett magok vákuumban megtesznek, mielőtt gamma-sugárzást emittálnak — kényelmesen mérhető távolság [123].

A fenti megfontolások alapján megvalósított kísérleti elrendezés a 3.4.a ábrán látható. A nehéz ionnyaláb vékony targetbe ütközik, így a compaund mag  $v$  sebességgel szabadon repülhet ki a vákuumba [124].

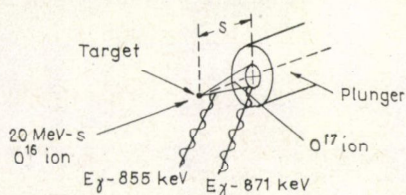
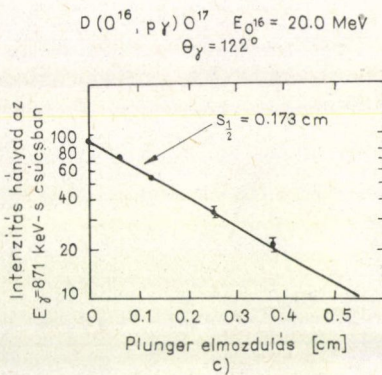
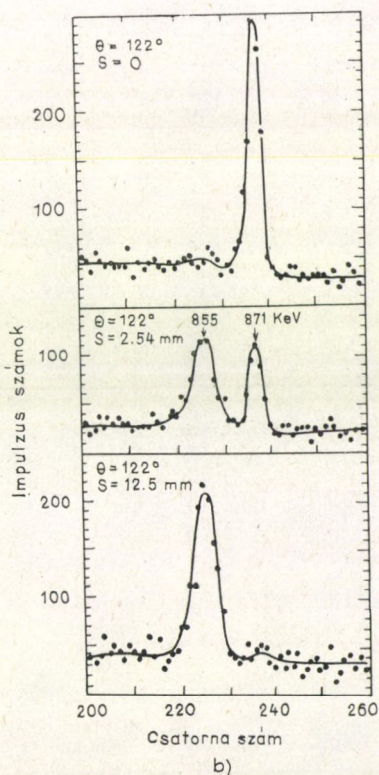
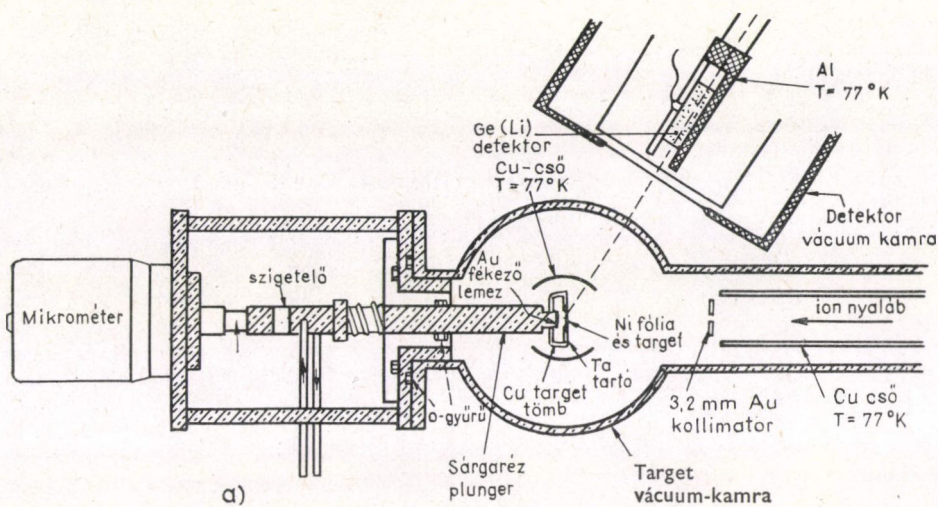
Az  $s = vt$  távolságra helyezett fém lemezben lefékeződött magok  $\gamma$ -intenzitásából a  $t$  ideig gerjesztett állapotban maradt magok száma meghatározható. Az a gamma-sugárzás, mely a fémlemez elérése előtt lebomló magok emissziójából adódik, a (3.1) egyenletnek megfelelően Doppler eltolódást szenved, s a  $90^\circ$ -nál nagyobb szögben elhelyezett Ge/Li detektorral felvett spektrumban külön vonalként jelenik meg. Az eltolódott csúcs intenzitása:

$$I_s = I_0(1 - e^{-s/v\tau}).$$

A helyben maradt csúcs intenzitása:

$$I_u = I_0 e^{-s/v\tau}.$$





3.4. ábra. A  $(^{16}\text{O}, p\gamma)^{17}\text{O}$  reakcióval kapott eredmények plunger módszer alkalmazása esetén a) kísérleti elrendezés; b) különböző plunger távolságnál kapott  $\gamma$ -spektrum; c) intenzitáshányad plunger távolság függvényében



Így az

$$\frac{I_u}{I_s + I_u} e^{-s/v\tau} \quad \text{viszonynak}$$

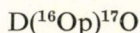
$s$  függvényében történő mérése megadja a  $\tau$  élettartamot, ha  $v$  értéke ismert.

A  $v$  visszalökési sebesség az adott szöghöz tartozó Doppler eltolódásból vagy a reakció kinematikájából, számítással határozható meg.

### 3.1.2.1. Kísérleti technika és eredmények

Mint korábban kimutattuk a visszalökött mag bomlása idején ismert sebesség felhasználásával a magnívó élettartama meghatározható. A gerjesztett mag nívóinak élettartam mérése végeredményben a repülésük közben kibocsátott gamma-sugárzás Doppler eltolódásának vizsgálatára korlátozódik: a gyakorlatban fékező plunger használunk fel a sebesség-eloszlás,  $s$  következképpen az élettartam meghatározására. Ilyen plungertechnika kísérleti berendezését a 3.4.a ábra szemlélteti [125].

A módszer ellenőrzéseként  $^{17}\text{O}$  gerjesztett állapotának jól ismert élettartamát vizsgálták: a kísérletekben 20 MeV-os négyszeres töltésű  $^{16}\text{O}$  ionokkal dolgoztak, s a



reakciót használták fel az  $^{17}\text{O}$  0,871 MeV-os állapotának élettartam méréséhez.

A 3.4.b ábra szemlélteti a Ge/Li detektorral felvett gamma spektrumot különböző target-plunger távolságok esetén; jól látható, az eltolódott gammasugárzás-hányad változása a távolság függvényében. Az intenzitáshányad plunger-eltolódás függvényében kapott változását a 3.4.c ábra mutatja. A csökkenés exponenciális faktornak megfelelő mértékű  $s_m = 2,50 \pm 0,22$  mm távolság esetén.

A mért eltolódásból kapott közepes sebesség:

$$v/c = (3,58 \pm 0,24)\%$$

ahol  $c$  a fénysebesség.

Figyelembe véve  $s_m$  és  $v/c$  mért értékét az  $^{17}\text{O}$  első gerjesztett nívójára

$$\tau = s_m/v_0,$$

illetve

$$\tau_k = (2,33 \pm 0,26) 10^{-10} \text{ sec},$$

ahol  $\tau_k$  a közepes élettartam.

Ebben az esetben a megfigyelt élettartam elég hosszú ahhoz, hogy direkt elektronikus módszert alkalmazzunk, az eredmény:

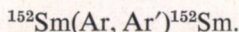
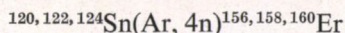
$$\tau = (2,51 \pm 0,03) 10^{-10} \text{ sec}.$$

A két mérés közötti egyezés megfelelő biztosíték arra, hogy az RD-módszer rövidebb élettartamok mérésére is felhasználható legyen [126].



### 3.1.2.2. Nehéz target magokkal végzett RD-kísérletek

Az RD-módszer korábban csak a könnyű magok esetén volt használatos. Diamond és társai alkalmazták először ezt az eljárást nehéz target magokkal kapcsolatos élettartam méréseknél [127, 128]. A vizsgált gerjesztett nivókat egyrészt compaundmag reakcióval, másrészt Coulomb gerjesztéssel hozták létre:



Az élettartam méréseknél alkalmazott RD-módszerrel megvalósított kísérlet sematikus vázlatát a 3.5.a ábra szemlélteti.

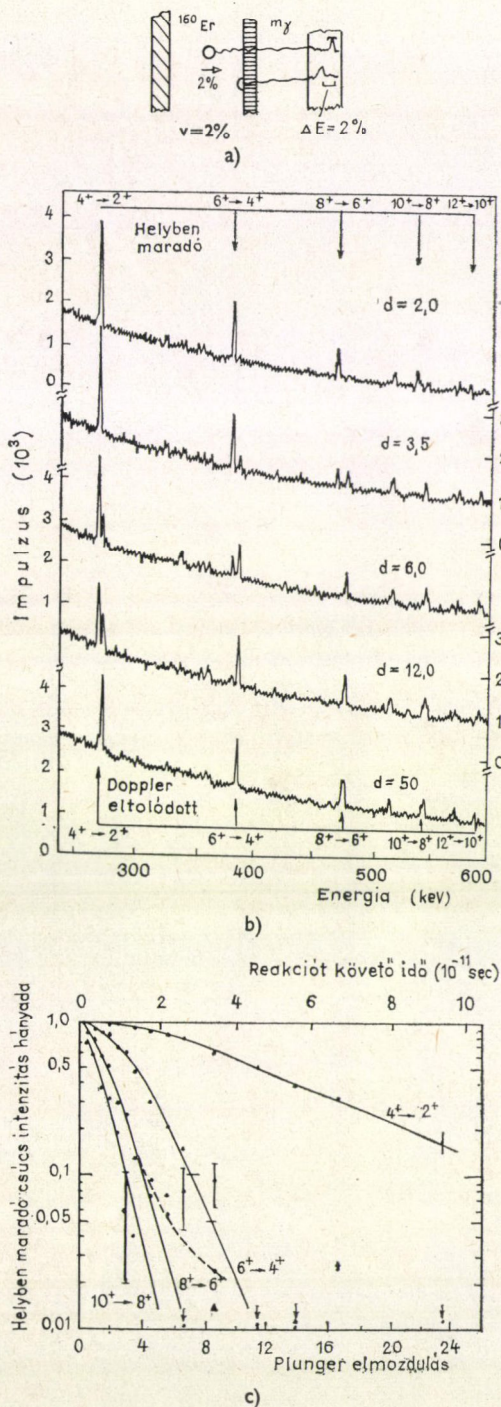
Az  $(\text{Ar}, 4n)$  reakció jól kollimált nyalábot eredményez, mely az ionnyaláb irányába esik: az ehhez képest  $0^\circ$  alatt elhelyezett Ge/Li detektorral felvett spektrumban az összes eltolódott és a helyben maradt  $\gamma$ -vonalak jól elkülönülnek.

A közepes visszalökési sebesség közvetlenül az eltolódott és a helyben maradt csúcsok közötti különbségből számolható; a kapott sebesség  $v/c=2\%$ .

A target  $1 \text{ mg/cm}^2$  vastagságú,  $10 \mu$  felületi egyenetlenségű fém fólia, mely  $\varnothing 1,5 \text{ mm}$  Ta-tárcsára került felerősítésre.

Különböző plunger-target távolságoknál az  $^{160}\text{Er}$ -ra kapott gamma-spektrumot a 3.5.b ábra mutatja.

3.5. ábra.  $(\text{Ar}, 4n)$  reakcióval gerjesztett magok élettartam vizsgálata plunger technikával. (a, kísérlet elve; b, Doppler eltolódott  $\gamma$ -spektrum  $^{160}\text{Er}$  esetén; c, bomlási görbe)





A csúcsok alatti terület integrálása után kiszámítható a helyben maradt csúcsok hányada minden egyes távolságnál.

A 3.5.c ábrán láthatók a kísérletileg kapott pontok és az  $^{160}\text{Er}$ -ra számított görbék.

A bemutatott élettartam mérési mód kielégítő pontosságú, s lehetőséget ad arra, hogy a (HI, Xn) típusú reakciókkal kapcsolatos élettartam és reakció időkre szisztematikus információkat nyerjünk.

### 3.1.2.3. Következtetés

Az RD-módszer pontosság tekintetében felülmúlja a DSA-módszert, mivel felhasználásánál a  $dE/dx$  fajlagos energiavesztés ismerete nem szükséges. Az RD-módszer alkalmazhatóságának alsó határa a [100] kísérletek alapján becslések végezhetőek. Figyelembe véve az összes kísérleti körülményt, megállapítható, hogy a  $\tau$  mérhető alsó határértékét a bomlási görbe határolja be. A bomlási görbe korlátozása  $D_m = 5 \cdot 10^{-4}$  cm-nek felel meg;  $v/c$  2%-os visszalökési sebesség esetén az RD-módszer alsó határa  $\tau = 1$  psec.

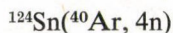
Az elemzések összegezeként megállapítható, hogy az RD-technika pontos vizsgálati módszer élettartamok mérésére 1—100 psec közepes élettartam időintervallumban. ( $10^{-12}$ — $10^{-10}$  sec). A DSA-módszer az ettől kisebb élettartamok tartományát fedi le, egészen a  $10^{-15}$  sec-ig, míg az elektronikus időmérési eljárás a nagyobb élettartamok meghatározására alkalmazható  $\cong 10^{-10}$  sec esetén.

## 3.2. Nehéz ionokkal gerjesztett magok élettartamának mérése Doppler-effektus felhasználásával

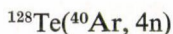
A 2. fejezetben részletesen bemutatott nagyfelbontóképességű, lítium-driftelt germánium detektorok kifejlesztésével lehetőség nyílt a gerjesztett atommagok energianívóinak élettartam mérésére az  $5 \cdot 10^{-10}$ — $10^{-12}$  sec időintervallumban.

A nehéz ionokkal végzett reakciók felhasználása lehetővé tették a vizsgált atommagok tartományának és az energianívók mérhető élettartam-intervallumának jelentős mértékű kibővítését [127].

Jelen dolgozatban a



továbbá a



reakciókkal létrehozott  $^{160}\text{Er}$ , illetve a  $^{164}\text{Yb}$  alapállapotához tartozó rotációs sávbeli nívók élettartamát határoztuk meg [129, 130, 131, 132].

### 3.2.1. A vizsgálati eljárás kísérleti megvalósítása

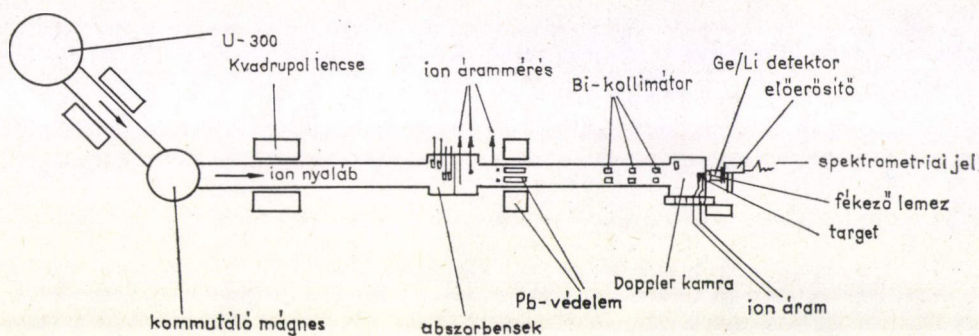
Az élettartam mérésekhez úgynevezett „plunger” módszert dolgoztunk ki [129].

A módszer lényege a következő. A nehéz ionokkal létrehozott reakciófolyamatban — vékony target alkalmazása esetén — gerjesztett, visszalökött magok vákuumtérben mozogva a Doppler-effektusnak megfelelően eltolódott energiájú  $\gamma$ -kvantu-



mokat emittálnak. A target közelében elhelyezett fém-fékezőlemezzel (plunger), a mozgásban levő magok egy része a  $\gamma$ -kvantum kibocsátása előtt lefékezhető. A sugárnyaláb tengelyében rögzített Ge/Li detektor a két gamma-csúcs felbontására képes, melyek közül az egyik a repülés közben lebomló magoknak, a másik pedig a fémlemezben lefékezett magoknak felel meg. A két csúcs relatív intenzitásának a target és a fékezőlemez közötti távolság függvényében történő mérésével meghatározható a gerjesztett állapot bomlási görbéje.

A Magreakciók Laboratóriumában (Dubna) végzett kísérletek mérési elrendezésének blokk-vázlatát a 3.6. ábra szemlélteti.



3.6. ábra. Élettartam mérés kísérleti elrendezése

A gerjesztett energianívó  $5 \cdot 10^{-12}$  sec értéket meghaladó élettartama és a visszalökött magok  $v/c \sim 2\%$ -os sebessége esetén a visszalökött magok  $\gamma$ -kvantum emissziója előtti, közepes repülési úthossza meghaladja a  $10^{-3}$  cm-t. Fenti visszalökési sebesség mellett a 100 keV-nál nagyobb energiájú  $\gamma$ -kvantumok energia-eltolódása meghaladja a 2,0 keV-ot. Ezek az adatok meghatározzák a kísérletekben felhasználható detektor energia felbontóképességét, továbbá a target, illetve plunger közötti távolság mérési pontosságával szemben támasztott követelményeket.

### 3.2.1.1. Targetet és plungert magában foglaló kamra

Annak érdekében, hogy a fent ismertetett módszerre jellemző mérési pontosságot a mérendő élettartam intervallumban ( $10^{-10}$ — $10^{-12}$  sec) hatékonyan kihasználjuk, szükséges volt a kamra konstrukciós kialakítása során a következő alapvető feladatok megoldása:

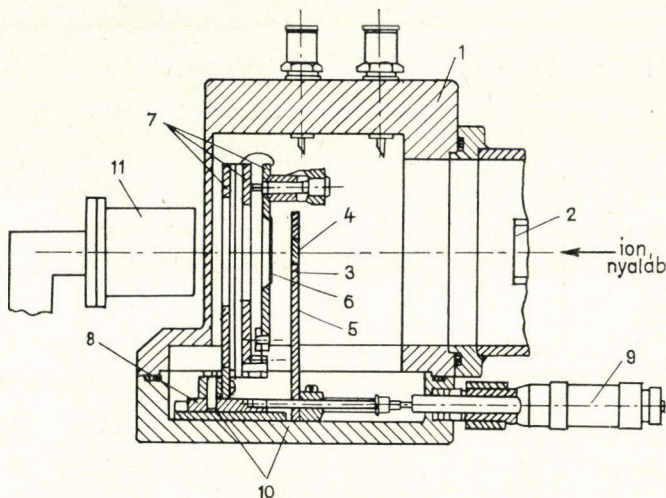
- a target-plunger nagypontosságú párhuzamos beállítása;
- az adott beállítás megtartása a mérésnél alkalmazott target-plunger távolság intervallumban.

Abban az esetben, ha a visszalökött magok sebessége a fénysebesség 2%-át teszik ki, úgy a mérési tartomány néhány mikrontól néhány milliméterig terjed.

A mérési elrendezés vázlatát a 3.7 ábra mutatja [130]. A töltött részecskenyaláb a kamrába a fékező lemezeket keresztül lép be, majd a centrozást biztosító diafragma-rendszeren keresztül jut a targetre, s nyelődik el a plungerben. A targetet — 10 mm.



átmérőjű és  $1 \text{ mgr/cm}^2$  vastagságú fóliát — bizmutból készült hálóra rögzítettük, melyet tartóba helyeztünk. A targetból kiváló visszalökött magokat bizmut réteggel borított plunger fékezi le. A bizmut felhasználása lehetővé teszi a fékezőlemez és a targettartó Coulomb-gerjesztése következtében kialakuló gamma-háttér lényeges csökkentését. A fékezőlemez és a target síkjának párhuzamos beállítása, funkcióját



3.7. ábra. Élettartam mérésekre szolgáló Doppler-kamra elrendezési vázlat 1. kamra, 2. diafragma, 3. target, 4. Bi-rács, 5. target tartó, 6. Bi fékező lemez, 7. plunger orientációt beállító berendezés, 8. vetető sín, 9. mikrométer, 10. szigetelő, 11. Ge/Li detektor

tekintve a goniométerhez hasonló készülék segítségével valósítható meg, ami biztosítja a fékezőlemez két, egymásra merőleges és a nyaláb irányára is merőleges tengely körüli elfordulását. A fékezőlemez és a forgatását biztosító mechanizmusok, köszörműlt felületen csúszó tartólapra kerültek felszerelésre. E készülék segítségével valósul meg a plunger mozgatása, rögzített target esetén. A konstrukció kialakítás  $10 \mu\text{m}$ -tól  $10 \text{ mm}$ -ig terjedő távolságtartományban biztosítja a plunger orientációjának megtartását. A tartólap helyzete a kamrán kívül elhelyezett mikrométer segítségével változtatható. A mérendő távolság beállítási pontossága:  $5 \mu\text{m}$ .

A targettartó és a plunger a kamra fém házától elektromosan szigetelt, ami lehetővé teszi a targeten áthaladó és a targettartó által elnyelt nyaláb áramának meghatározását, s ezzel a nyalábvezetés optimalizálását.

### 3.2.1.2. Doppler-eltolódás méréseire szolgáló Ge/Li detektor

A plunger-módszer megvalósításához —  $100\text{--}600 \text{ keV}$  közötti energiatartományban, a visszalökött magok  $10^9 \text{ cm/sec}$  sebessége mellett — legalább  $1,3\text{--}1,8 \text{ keV}$  felbontóképességű  $\gamma$ -detektor szükséges.

A kísérletekhez felhasznált detektor a 2. fejezetben ismertetett módon, galliummal doppolt p-típusú germániumból lítium-ion drifteléssel készült.

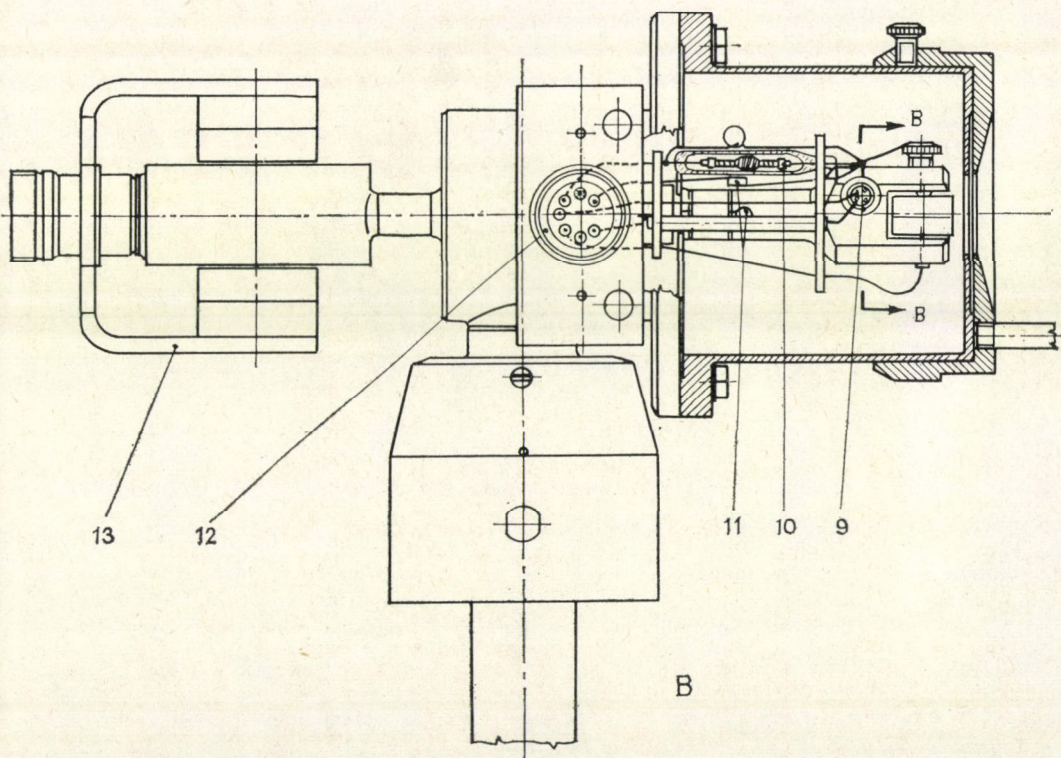


### 3.2.1.3. Detektor-kriosztát konstrukciós tulajdonságai

A Ge/Li detektor elhelyezésére speciális kriosztátot dolgoztunk ki, amely lehetővé tette az előerősítő első fokozatát képező FET hűtését, ugyanakkor biztosította a hosszú idejű üzemeltetést (3.8 ábra).

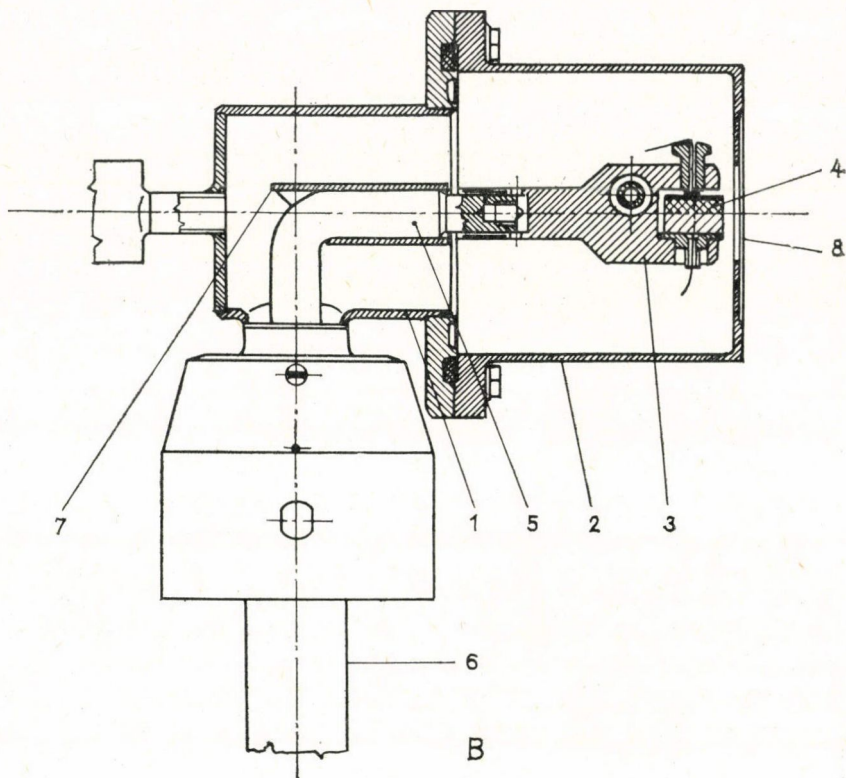
Legnagyobb problémát a detektor mikrofon-érzékenysége jelenti, minthogy gyakorlatilag a hűtésre szolgáló folyékony  $N_2$  forrásából adódó zajt is érzékeli. Ezen zajok csökkentésére a detektor és FET teflon-amortizátorokra épült. Az előerősítő hűtött előfokozatában (3.9. ábra) alkalmazott 2N 4416 típusú FET minimális zaja, továbbá maximális mereksége 130 K-nél volt. Ezen optimális hőmérséklet kombinált hőhíddal állítható be, mely teflonból és COR anyagból készült. Ez a konstrukció egyben a FET mikrofonérzékenységét is csökkentette. A külső mechanikai hatások kiküszöbölésére a teljes hűtőfokozat szerelése ugyancsak amortizátorokra történt.

A  $\gamma$ -sugárzás szóródásának csökkentése érdekében a detektor-kamra, illetve -tartószerkezet összes mechanikai alkotóelemei alumíniumból készültek. A detektor-kamra belépő ablakául igen vékony Be-lemezt használtunk (falvastagság  $180 \mu$ ), amely lehetővé tette 2 keV-től a  $\gamma$ -kvantumok energiamérését.



3.8 ábra





3.8. ábra. Doppler kísérletekben felhasznált kriosztát konstrukció. 1. kriosztát-ház, 2. detektorkamra, 3. detektor és FET-tartó, 4. Ge/Li detektor, 5. hűtő-vezető, 6. COR-cső, 7. árnyékoló, 8. Be-ablak, 9. FET, 10. ellenállás, 11. hűtött előfokozat alkotóelemei, 12. vákuumtömítés, 13. Ti-iongetter szivattyú.

Ge/Li detektor rögzítése Al-tartóba épített zafir alátétre történt a detektor  $n^+$  oldalán alkalmazott tefloncsavar felhasználásával. A detektort a Be-ablak mögött úgy helyeztük el, hogy a mérendő nyaláb közvetlen az  $i$ -réteget érje.

Az előerősítő közvetlenül a kriosztátfejhez csatlakozik s a hűtött előfokozattal való kapcsolat vákuumzáró elektromos jelkivezető rendszeren keresztül valósul meg.

A kriosztát lezárásához szorbiós-szublimációs-Ti-iongetter szivattyú-rendszert alkalmaztunk  $10^{-6}$  Hg mm vákuum eléréséig — ezt követően hideg hegesztéssel zárjuk le a rendszert. A kriosztáttal együtt szerelt Ti-iongetter szivattyú (0,5 l/sec) biztosítja a rendszer hosszúidejű üzemben tartását — s szükség esetén az üzemeltetési vákuum fenntartását.

### 3.2.1.4. Ge/Li detektorral kapott mérési eredmények

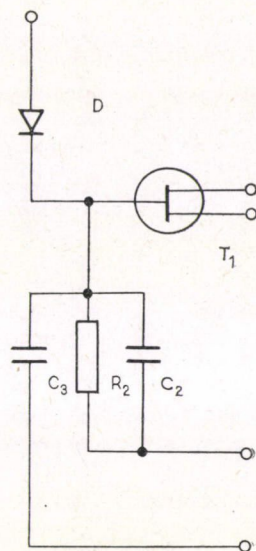
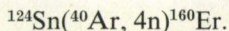
Az élettartam meghatározási kísérletekben a Dopplertolódás mérésére alkalmazott Ge/Li detektor jele az előerősítő — erősítő lánc után a formáló fokozattal ellátott második erősítőre, majd az állandó amplitúdójú összetevőt reprodukáló fokozatra, illetve a 4096-csatornás amplitúdó-analizátorra kerül. Az aktivációs háttér csökkentése érdekében az amplitúdó konverter blokkolását a ciklotron nagyfrekvenciás generátorának modulátorával vezéreltük az ionnyaláb impulzusok közötti időtartamra.

A mérőrendszerben felhasznált Ge/Li detektor energiafelbontása  $^{57}\text{Co}$  izotóp 121,9 keV-os  $\gamma$ -vonalára 1,1 keV volt. Ez a felbontás gyakorlatilag nem változott az ionnyalábban végzett kísérletek során [104].

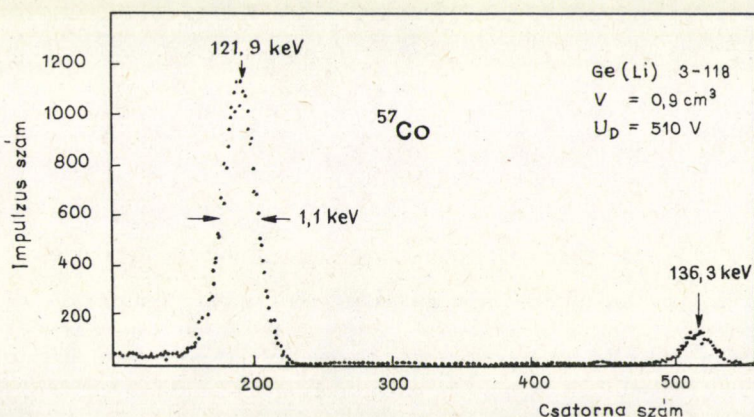
A 3.10. ábrán látható a hűtött FET-bemenettel rendelkező Ge/Li detektorral — standard bemérő láncsal — felvett  $\gamma$ -spektrum  $^{57}\text{Co}$  izotóp esetén, míg a 3.11. ábra az ionnyalábban végzett mérések során  $^{164}\text{Yb}$ -ra kapott  $\gamma$ -spektrumot ábrázolja.

### 3.2.2. A $^{160}\text{Er}$ nívóinak élettartam vizsgálata

Kísérleteinket a Magreakciók Laboratóriuma U—300 típusú nehéz ion gyorsítóján végeztük. A külső ionnyalábbal megvalósított reakció:

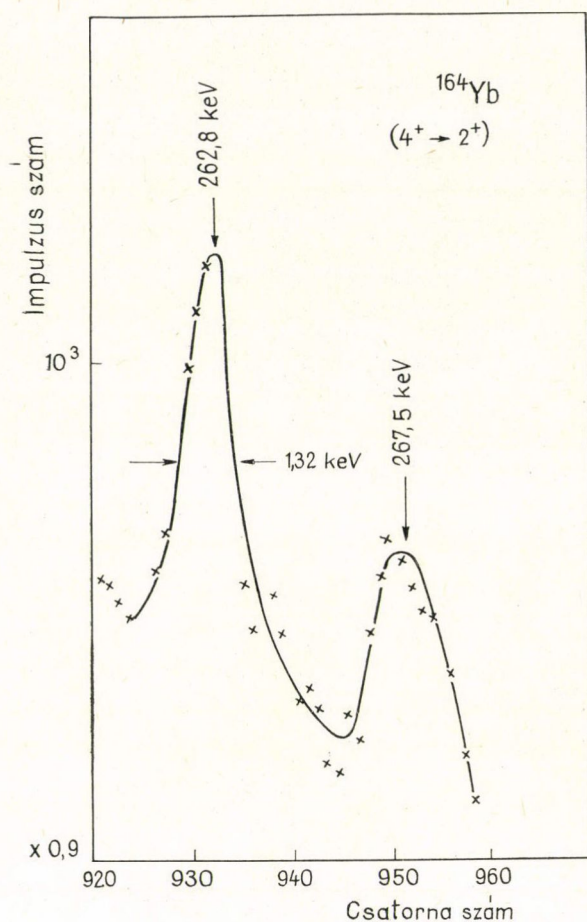


3.9. ábra. Előerősítő krosztátban elhelyezett hűtött fokozatának blokvázlata.  $T_1$ . FET (2N 4416),  $R_2$ . terhelő ellenállás, (5 G $\Omega$ ),  $C_2$ . visszacsatoló kondenzátor (0,5 pF),  $C_3$ . kapacitás kalibrációhoz (0,5 pF), D. Ge/Li detektor



3.10. ábra. A Doppler kísérleten felhasznált Ge/Li detektorral  $^{57}\text{Co}$  izotóp esetén felvett  $\gamma$ -spektrum

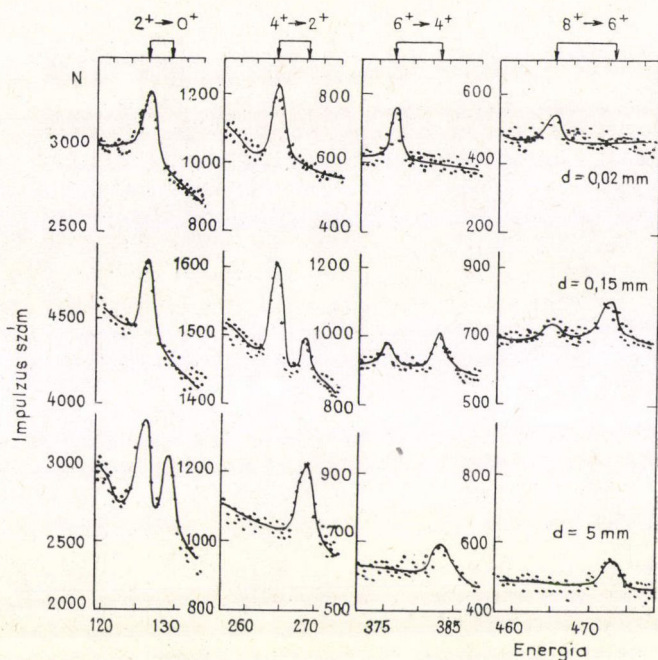




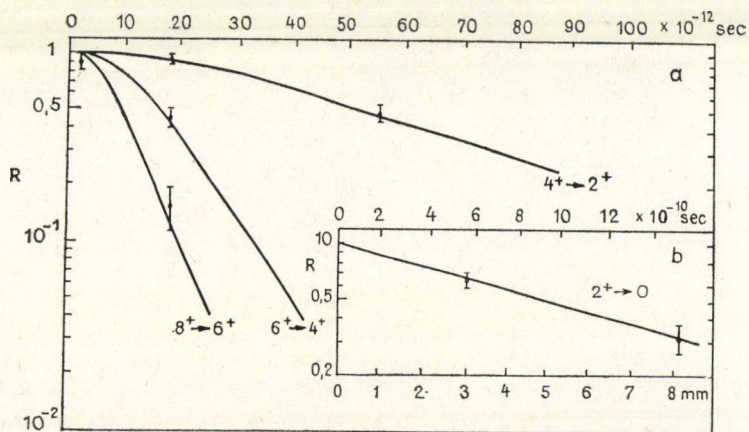
3.11. ábra. A Ge/Li detektorral  $^{164}\text{Yb}$ -ra kapott  $\gamma$ -spektrum

A mérőberendezés működésének ellenőrzése céljából elvégeztük a rotációs nívók élettartam mérését  $^{160}\text{Er}$  izotóp alapállapota esetén, melyeket korábban már megvizsgáltak [128].

A  $^{124}\text{Sn}$ -ból készült target vastagsága  $1 \text{ mgr/cm}^2$  volt. A 3.12. ábra különböző target-plunger távolság esetén kapott gamma-spektrumokat mutatja. Ezek segítségével nyomon követhető a helyben maradó, illetve eltolódott csúcsok intenzitásváltozása a rotációs nívók közötti átmenetre  $^{160}\text{Er}$  izotóp esetén. A megfelelő csúcspárok energiakülönbségéből, a detektor véges méreteire vonatkozó korrekciós tényező figyelembevételével, meghatároztuk a visszalökött magok sebességét, melyre  $0,018c$  értéket kaptunk. Az előbbi kísérlet alapvetően az élettartam mérések pontosságára adott tájékoztatást. A 3.12. ábrán látható spektrumok összehasonlítása a közölt ada-



3.12. ábra.  $^{160}\text{Er}$ -ra kapott  $\gamma$ -spektrumok különböző target-plunger távolság esetén



3.13. ábra. A  $4^+ \rightarrow 2^+$ ,  $6^+ \rightarrow 4^+$ ,  $8^+ \rightarrow 6^+$  illetve a  $2^+ \rightarrow 0^+$  átmenetekre vonatkozó bomlási görbék



tokkal, azt bizonyítja, hogy kísérleteinkben a csúcshatár alatti területek arányának meghatározásánál az elért pontosság megközelítően azonos.

A 3.13.a ábra a helyben maradó csúcsok intenzitás-hányadának ( $R = I_u + I_s$ ) változását mutatja a távolság függvényében, a  $4^+ \rightarrow 2^+$ ;  $6^+ \rightarrow 4^+$ ;  $8^+ \rightarrow 6^+$  átmenetek esetében, a 3.13.b ábra a  $2^+ \rightarrow 0^+$  átmenet bomlási görbáját szemlélteti.

A 3.13.b ábrán folytonos vonallal tüntettük fel Diamond adatait; ezek kis távolságlépésekben megvalósított részletes mérések eredményét ábrázolják.

A pontok jelen kísérleti munka adatait jelölik. Az ábrából látható, hogy az általunk kapott eredmények a kísérlet pontossági határain belül a megfelelő görbéken helyezkednek el. Ebből következik, hogy a kísérleti eredményeink feldolgozásakor az

említett eredményekhez közeli élet-tartam-adatokat kell kapnunk.

A 3.2. táblázat tartalmazza kísérleteink során a  $^{160}\text{Er}$  energianívóira kapott felezési időket. Valamennyi átmenet esetében jó egyezés figyelhető meg a korábbi munkák eredményeivel. Az általunk kapott eredmények kisebb pontossága azal magyarázható, hogy az átmenetekhez tartozó bomlási görbéken a kísérleti pontok száma kevesebb. Energianívók részletesebb élettartam mérése esetén az elérhető pontosság  $\sim 5\%$ .

### 3.2. TÁBLÁZAT

$^{160}\text{Er}$  energianívóinak élettartama

Átmenet	$E_\gamma$ [keV]	$\tau \cdot 10^{-12}$ (sec)	
		Kísérletünkben kapott adatok	Korábbi mérés eredménye
$2 \rightarrow 0$	126,2	$910 \pm 140$	$919 \pm 46$
$4 \rightarrow 2$	264,3	$37 \pm 6$	$34,5 \pm 1,7$
$6 \rightarrow 4$	376,3	$5,9 \pm 1,2$	$3,39 \pm 0,47$
$8 \rightarrow 6$	464,6	$2,4 \pm 0,5$	$2,16 \pm 0,47$
$10 \rightarrow 8$	532,1	—	$1,24 \pm 0,47$

Az elvégzett kísérletek alapján, következtetésképpen megállapítható, hogy az ismertett mérőberendezés segítségével a  $10^{-10}$ — $10^{-12}$  sec időintervallumba eső élettartam mérés számos neutrondeficitos mag esetében; így többek között  $^{40}\text{Ar}$ ,  $^{32}\text{S}$ ,  $^{31}\text{P}$  nehéz ionokkal létrehozott compaund magokban eredményesen megvalósítható.

### 3.2.3. $^{164}\text{Yb}$ rotációs nívóinak élettartam meghatározása

#### 3.2.3.1. Kísérleti megvalósítás

A vizsgálatokhoz



reakciót használtuk fel. Az argon-ion nyálábót  $\varnothing 8$  mm méretű bizmutból készült diafragmák segítségével kollimáltuk.

A  $800 \mu\text{gr}/\text{cm}^2$  vastagságú targetet a  $^{128}\text{Te}$  fémizotóp  $0,7 \mu\text{m}$  vastagságú Al-hordozóra történt vákuumgőzölésével állítottuk elő. A hordozót alumínium rácsra rögzítettük. A visszalökött magok átlagsebességére kísérleteinkben  $v = (0,0205 \pm 0,0004)c$  értéket kaptunk.

## 3.2.3.2. A mérési adatok feldolgozása

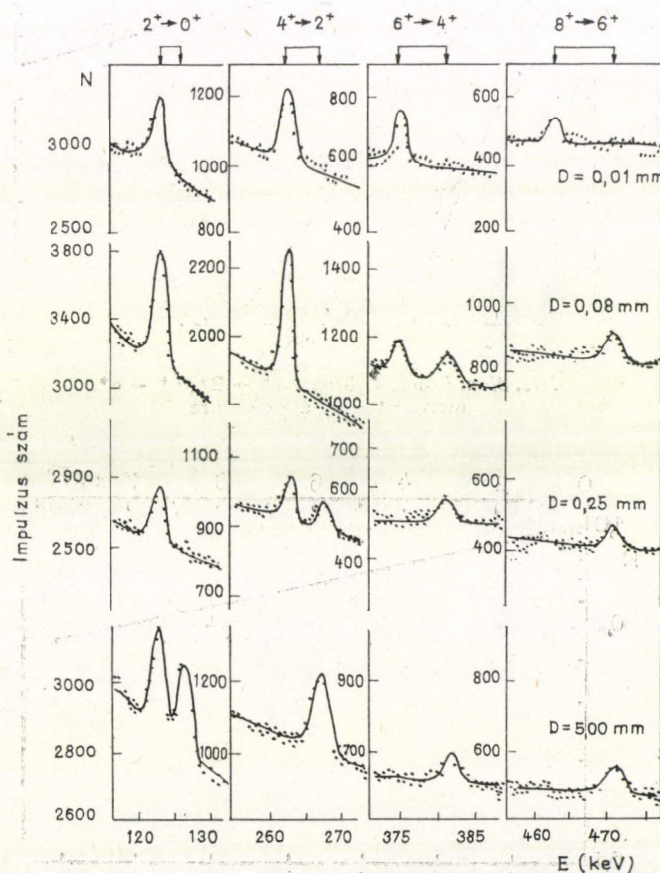
Az  $I_s$  eltolódott, illetve az  $I_u$  helyben maradó csúcshoz tartozó  $\gamma$ -sugárzás intenzitása, különállóan gerjesztett nívó lebomlását feltételezve, az alábbi módon fejezhető ki:

$$I_s = n(1 - e^{-t/\tau}) \quad (3.10)$$

$$I_u = ne^{-t/\tau} \quad (3.11)$$

ahol  $n$  a reakcióban keletkezett  $\gamma$ -kvantumok összessége;  $t = D/v$  a compaund mag repülési ideje  $D$  target-plunger távolság, illetve  $v$  sebesség esetén;  $\tau$  a gerjesztett nívó közepes élettartama.

A helyben maradt csúcs  $R(D) = I_u / (I_u + I_s)$  intenzitáshányadának változása a reakciót követő idő függvényében, a gerjesztett nívó  $R(D) = e^{-D/v\tau}$  alakú bomlási



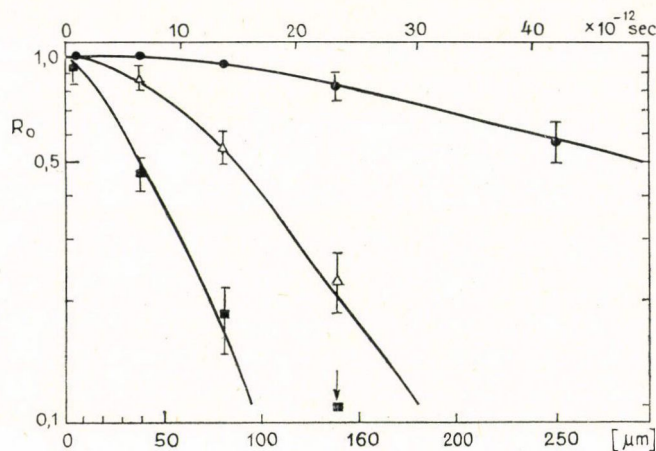
3.14. ábra. Rotációs nívók közötti átmenetek során emittált  $\gamma$ -sugárzás spektruma  $^{164}\text{Yb}$  esetén



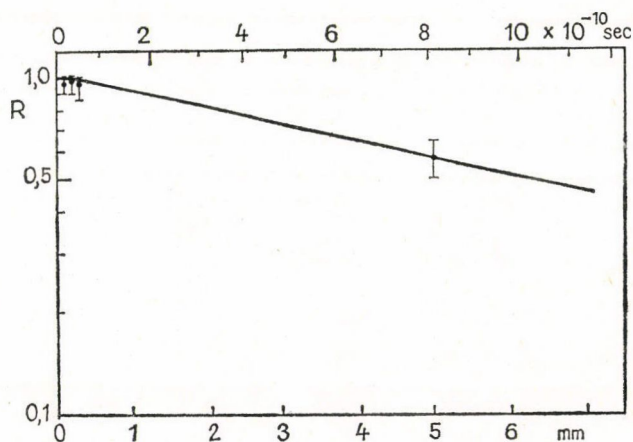
görbéjét eredményezi. Ezért az összefüggés csak akkor érvényes, ha a  $\gamma$ -sugárzás szögeloszlása az időtől független [130].

Több gerjesztett nívó egymás után bekövetkező bomlása esetén az egyes nívók élettartamának  $R(D)$  összefüggésből történő meghatározása, valamivel bonyolultabb. Nehéz részecskékkal, mint például a  $^{40}\text{Ar}$ ,  $^{32}\text{S}$ ,  $^{31}\text{P}$  ionokkal létrehozott compundmag reakciókban a kollektív sáv feltöltése csaknem teljes mértékben nagy spin értékek esetén megy végbe [131].

Ezért meg kell vizsgálni a rotációs alapsáv  $i$  nívói közötti —  $t$  átlagos élettartamú — átmeneteket. Ha feltételezzük, hogy az egymást követő rotációs nívók csak az előző nívó bomlásából töltődnek fel és nincsenek közvetlen átmenetek a magasabb szinteken levő nívókról, akkor a reakció befejezését követő pillanatban az  $i$ -k nívón talál-



3.15. ábra. Bomlási görbe a  $4^+ \rightarrow 2^+$ ,  $6^+ \rightarrow 4^+$  illetve  $8^+ \rightarrow 6^+$  átmenetekre



3.16. ábra. Bomlási görbe  $2^+ \rightarrow 0^+$  átmenetre

ható visszalökött magok  $N_i(t)$  számát a radioaktív bomlásra vonatkozó összefüggés alapján határozhatjuk meg.

Az összes átmenetre közelítést alkalmazva  $\tau_0$  idejű exponenciális lebomlást feltételezve  $N_0(0)=1$ ,  $N_i(0)=0$ ,  $i=1, 2, \dots$  kezdeti feltételek mellett a  $0 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \dots$  bomlási sort kapjuk.

Felírható, hogy

$$(I_u + I_s) = n \sum_{i=0}^j N_i(0) = n_0(0) = n \quad (3.12)$$

és

$$(I_u)_j = n \sum_{i=0}^j N_i(t), \quad t = D/v, \quad (3.13)$$

ekkor:

$$R_j = \left( \frac{I_u}{I_u + I_s} \right)_j = \sum_{i=0}^j N_i(t). \quad (3.14)$$

Ezeket az összefüggéseket felhasználva a bomlási sor  $N_i(t)$  értékének meghatározására kapjuk:

$$R_j = \sum_{i=0}^j \mu_{ji} e^{-t/\tau_i} \quad (3.15)$$

ahol:

$$\mu_{ji} = \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq i}}^j \frac{\tau_i}{\tau_i - \tau_l}.$$

Feltételezve, hogy  $\tau_j \gg \tau_i$ , ami a  $j=1, (2)$  átmenetek kivételével általában igaz, továbbá, valamennyi exponenst elhanyagolva a 3.15 egyenletben  $i=j$  kivételével  $t \gg \tau_j$  mellett, az alábbiakat kapjuk:

$$R_j = \left[ \prod_{l=0}^{j-1} \frac{\tau_j}{\tau_j - \tau_l} \right] e^{-t/\tau_j} = e^{-(t - \sum_{m=0}^{j-1} \tau_m)/\tau_j}. \quad (3.16)$$

Ezzel egy, de a  $\sum_{m=0}^{j-1} \tau_m$  zérus pontba eltolt exponenst kapunk, vagyis ebben a közelítésben a  $j \rightarrow j+1$  átmenet ideje a reakciót követő átmenetek élettartamának összege.

A  $^{164}\text{Yb}$  rotációs nívói közötti átmenetekre vonatkozó relatív intenzitás változás az eltolódott, illetve helyben maradó csúcsok esetén a 3.15. és 3.16. ábrák mutatják. A spektrumok feldolgozásakor meghatároztuk az eltolódott és a helyben maradó csúcsok területét és az  $R(D) = \frac{I_u}{I_u + I_s}$  arányt. Az  $R(D)$  hányadosok meghatározása előtt a kísérletek szisztematikus hibái miatt korrekciót eszközöltünk [132]. Jelöljük  $R_0 = e^{-t/\tau}$ -val a már helyesbített és  $R = \frac{I_u}{I_u - I_s}$ -vel az adott hányados nem helyesbített értékét. Ezek között a következő kapcsolat áll fenn:

$$R = (1 + \delta) R_0 = (1 + \delta) e^{-t/\tau}. \quad (3.17)$$

A különböző korrekciók  $R$  hányadosra gyakorolt hatását az  $(1 + \delta)$  tényezővel vesszük figyelembe.



A korrekciós tényező az alábbiakban felsorolt effektusokat foglalja magába:

- visszalökött mag  $v$  sebességeloszlása az ion-nyaláb sebesség eloszlásának függvényében;
- $D$  távolság szórása;
- visszalökött magok behatolási mélysége a plungerbe;
- visszalökött magok  $\gamma$ -sugárzásának anizotrópiája;
- kúpszög relativisztikus változása;
- detektor hatásfokának változása.

1. Visszalökött mag ionnyaláb irányába mutató komponensének  $v$  sebességeloszlása függ az ionnyaláb sebességeloszlásától, a target vastagságától és a visszalökési szögektől. Ez  $v + \Delta v$  sebességek esetén a

$$\delta \approx [(1/2)(t/\tau)^2 - t/\tau](\Delta v/v)^2 \quad (3.18)$$

összefüggést eredményez: vagyis  $t = \tau$  mellett  $\delta = -0,01$ ,  $\Delta v = \pm 0,14v$  sebesség eloszlás esetén.

Kísérleteinkben  $|\delta| < 1\%$ , ezért ezen korrekciós faktor figyelembevétele elhanyagolható.

2.  $D$  távolság szórása a target-plunger non-parallelitása miatt.

Ez  $D \pm \Delta D$  határok közötti egyenletes szórása esetén (az ionnyaláb véges mérete, illetve különböző visszalökési szögek mellett jelent korrekciót):

$$1 + \delta \approx (v\tau/\Delta D) \operatorname{sh}(\Delta D/v\tau), \quad (3.19)$$

ahol  $v\tau = D$ ,  $t = \tau$  esetére, illetve  $\delta = \pm 0,01$ ,  $\Delta D = \pm 0,25D$  értéke mellett.

Ezen korrekciós faktor ugyancsak elhanyagolható, mivel a kísérletben megengedett  $\Delta D$  értékek miatt számszerű értéke igen kicsi.

3. Visszalökött magok behatolási mélysége a plungerbe  $\Delta x$  úthosszal azonos. Ha  $\Delta t = \Delta x/v$

$$1 + \delta \approx [e^{(3/2)(\Delta t/\tau)} + e^{-t/\tau} - e^{-(t-\Delta t)/\tau}]^{-1}, \quad (3.20)$$

ami  $t = \tau$  esetére  $\Delta t = 0,009t$  mellett  $\delta = -0,01$ , illetve  $\Delta t = 0,09t$  mellett  $\delta = -0,2$  értéket eredményez.

Ez azt jelenti, hogy a korrekciós faktor szerepe kis távolságok esetén jelentős.  $D \leq 11\Delta x$  távolságok esetén (esetünkben  $\Delta x = 5\mu$ ) a korrekciós faktort figyelembe kell venni ( $\delta \leq -0,1$ ).

4. Visszalökött magok  $\gamma$ -sugárzása anizotrop, s maximális értéke az ionnyaláb irányába esik. A szögeloszlás anizotrop jellege a vákuum térbe jutó visszalökött magok esetében, hiperfinom terék hatására gyengül.  $\gamma$ -sugárzás szögeloszlásának időbeni függése kísérleti geometriánk esetén a következő összefüggéssel írható le:

$$W(t) = 1 + \sum_{k=2,4} A_k Q_k G_k(t), \quad G_k(t) = e^{-t/\tau_k}$$

ahol  $t$  — a targetból kilépő mag kirepülése után eltelt idő,

$\tau_k$  — a hiperfinom gyengítés mértéke

$A_k$  — szögeloszlás paraméterei

$Q_k$  — a detektor véges kúpszögének paraméterei.

Az eltolódott és helyben maradt csúcsok intenzitásváltozását a következő összefüggések írják le:

$$(J_s)_0 = n \left\{ 1 - e^{-t/\tau} + \sum_{k=2,4} \tau_k / (\tau_k + \tau) [1 - e^{-t(\tau + \tau_k)/\tau\tau_k}] A_k Q_k \right\} \quad (3.21)$$

$$(J_u)_0 = n \left\{ e^{-t/\tau} + \sum_{k=2,4} e^{-t(\tau + \tau_k)/\tau\tau_k} A_k Q_k \right\}. \quad (3.22)$$

A szögeloszlás változásával kapcsolatos korrekciós faktor értékének meghatározását a  $G_k$  paraméterre vonatkozó adatok felhasználásával végeztük. Ez maximális értékű a  $4^+ \rightarrow 2^+$  átmenet esetén s R értékét  $\sim 3\%$ -al megnöveli  $t = \tau$  esetén ( $\delta = -0,029$ ).

5. A detektor kúpszögének — mely alatt a detektor a mozgásban levő visszalökött magból, a nyugalomban levőhöz képest látható — relativisztikus változása:

$$1 + \delta = [1 + (1 - R_0)\chi]^{-1}, \quad (3.23)$$

ahol

$$\chi = \{[1 + v/c]/[1 - (v/c) \cos \Phi_c]\} - 1 \approx 2v/c \quad (3.24)$$

$\Phi_c$  — szögnyílás fele, mely alatt a detektor látható.

Az összefüggés alapján  $t = \tau$  mellett  $\delta = 1,3 v/c$ , illetve  $v/c \approx 0,02$  esetén  $\delta$  értéke:  $\delta \approx -0,025$ .

6. Detektor hatásfokának  $\varepsilon_s$  eltolódott csúcsra vonatkozó, a helybenmaradó  $\varepsilon_u$  csúcsához viszonyított változása:

$$1 + \delta = [1 - (1 - R_0)\Delta\varepsilon]^{-1}, \quad \Delta\varepsilon = (\varepsilon_u - \varepsilon_s)/\varepsilon_u, \quad (3.25)$$

ahol  $\Delta\varepsilon \approx 0,025$ , s  $t = \tau$  esetében  $\delta = 0,015$ .

Látható, hogy az 5 és 6 alatti korrekciós faktorok 1% pontossággal egymást kompenzálják, ezért ezek szerepe/hatása a továbbiakban elhanyagolható.

7. Nagy távolságban lebombázott magokról látott detektor kúpszögváltozás a plungerben elbomló magokhoz viszonyítva:

$$1 + \delta = [1 - (1 - R_0)k]^{-1}, \quad (3.26)$$

ahol

$$k = (2/t_0)[t/(1 - e^{-t/\tau}) - \tau],$$

( $D_0$  detektor-target távolság,

$D_0 - D$  plunger-detektortávolság)

$t = \tau$  esetében  $k = 1,2 t/t_0$  vagy  $\delta = 0,75 t/t_0 = 0,75 D/D_0$ . Kísérleteinkben  $D_0 = 45$  mm.

Ez azt jelenti, hogy a  $2^+ \rightarrow 0^+$  átmenet esetében, melyre  $D = 4 - 8$  mm, a korrekciós tényezőt figyelembe kell venni ( $\delta \approx +0,1$ ) míg a többi átmenet esetében ( $D < 0,5$  mm) elhanyagolható ( $0 < \delta < 0,01$ ).

A korrekciós tényezőre vonatkozó számítások eredményét az összes átmenet esetén a 3.3 táblázat tartalmazza.

3.3. TÁBLÁZAT

Átmenet	$t(10^{-12} \text{ s})$	$\delta 1$	$\delta 2$	$\delta 3$	$\delta 4$	$\delta 5$	$\delta 6$	$\delta 7$	$\delta$
$8^+ \rightarrow 6^+$	7	-0,2	+0,18	-10	-0,5	-2,4	+3	+0,0	-9,92
$6^+ \rightarrow 4^+$		-0,2	+0,03	-5	-0,5	-1,4	+2	+0,0	-5,07
$4^+ \rightarrow 2^+$	40	-0,2	+0,0	-0,0	-3,5	-1,7	+2	+0,0	-4,4
$2^+ \rightarrow 0^+$	780	-0,2	+0,0	-0,0	-0,4	-1,8	+2	+6,3	+5,9



### 3.2.4. Kísérleti eredmények

A közepes élettartamokat a  $\tau_j$ -re vonatkozó egyenletrendszer számítógépes megoldásával határoztuk meg Newton típusú itterációs eljárás alkalmazásával [133]. A megoldáshoz az AUTORE standard programot használtuk fel [134].

A 3.15. és 3.16. ábrák mutatják a rotációs nívók közötti átmenetekre vonatkozó bomlási görbéket  $^{164}\text{Yb}$  esetén, melyeket  $\tau_j$  felhasználásával nyertünk. A kísérleti úton kapott pontok hibái a csúcsok alatti területből számított  $R$  hányados statisztikus hibáinak felel meg.

A 3.4. táblázat összefoglalja a  $^{164}\text{Yb}$  vizsgált átmeneteinek  $\gamma$ -energiáit, a  $T_{1/2}$  felezési időket, a teljes konverziós koeficienseket és az átmenetek  $B(E2)$  valószínűségét.

A  $T_{1/2}$  meghatározásának hibái egyrészt a csúcs alatti területek meghatározásának statisztikus hibáit, másrészt a  $v$  átlagsebesség hibáját foglalják magukban. Az első megfigyelhető  $8^+ \rightarrow 6^+$  átmenet esetében a feldolgozás határozatlansága is hibanövelő tényező, mivel felezési ideje a nem megfigyelhető felezési idők szummájához történő viszonyítással határozható meg.

3.4. TÁBLÁZAT

Átmenet	Energia [keV]	$T_{1/2}$ [ $10^{-12}$ sec]	$\alpha_T$	$B(E2)$ kísérleti adat	$B(E2)$ számított érték
2→0	123,5	$882 \pm 83$	1,50	$0,89 \pm 0,9$	(0,89)
4→2	262,8	$29,9 \pm 3$	0,117	$1,33 \pm 0,13$	1,27
6→4	375,0	$5,2 \pm 0,7$	0,038	$1,40 \pm 0,18$	1,40
8→6	462,8	$1,6 \pm 0,5$	0,022	$1,62 \pm 0,5$	1,47

A  $B(E2)$  kísérleti úton kapott adatait, s a számított adatokat a 3.4. táblázatban hasonlítjuk össze. A kísérlet pontosságának határain belül az adatok között megfigyelhető egyezés nem rosszabb, mint a  $^{164}\text{Yb}$  rotációs mag esetében elvárható.

Az ismert összefüggések [135] alapján a kísérleti úton kapott  $B(E2; 2 \rightarrow 0)$  adatokból meghatároztuk továbbá a  $^{164}\text{Yb}$ -ra vonatkozó  $Q_0$  belső kvadrupólmomentumot és a  $\beta$  kvadrupól deformációt, melyekre a  $(6,7 \pm 0,4) \cdot 10^{-24} \text{ cm}^2$ -t, illetve  $0,28 \pm 0,01$  értékeket kaptuk. A  $4^+$ ,  $6^+$  és  $8^+$  nívókra a kísérleti úton kapott  $B(E2)$  értékeiből meghatározott kvadrupólmomentumok a kísérleti hiba határain belül megegyeznek a  $Q_0$  értékével, melyet a  $B(E2; 2 \rightarrow 0)$ -ból határoztunk meg.

### ÖSSZEFOGLALÁS

Jelenlegi munka legfontosabb eredményei a következőkben foglalhatók össze:

1. Vizsgáltuk germániumban az n-i-p struktúra keletkezésének alapvető fizikai folyamatait, s kidolgoztuk a nagyérzékenységű planár és koaxiális konfigurációjú  $\gamma$ -spektrometriai detektorok előállítási metodikáját. Kimutattuk, hogy a detektorok előállításához p-típusú 8–30  $\Omega\text{cm}$  fajlagos ellenállású, 1–3  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  diszlokációjú s oxigént  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ -nál kisebb koncentrációban tartalmazó germánium alkalmas.

2. Korrelációs kapcsolatot állapítottunk meg a Ge/Li detektor felbontóképessége és az anyag  $\tau_{77\text{K}}$ -nál mért élettartam, továbbá a 9–11  $\mu$  hullámhossz tartományban mért IR transzmisszió



$\alpha$  értéke között, amely lehetővé tette a töltésgyűjtés optimális feltételeinek prognózisát. Kimutattuk, hogy maximális energia-felbontóképesség eléréséhez  $\alpha$  és  $\tau_{77K}$  paramétereknek a következő feltételeket kell kielégíteni;  $\alpha_{\lambda=10\mu} \leq 0,12 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\tau_{77K} \geq 20 \mu\text{sec}$ .

3. Vizsgáltuk a kompenzált tartomány Li precipitációjával összefüggő energia-felbontóképesség romlást — kimutattuk, hogy termikus sokk ( $\sim 400^\circ\text{C} - 1'$ ) alkalmazása lehetővé teszi az n-i-p struktúra regenerálódását, s a detektor energia-felbontóképességének javítását.

4. Detektor-sorozat üzemi paramétereinek vizsgálatai kimutatták, hogy a kidolgozott metodika lehetővé teszi reprodukálható spektrometriai paraméterekkel rendelkező detektorok előállítását. Az elért felbontóképesség 2,5 keV,  $E\gamma = 1332,6 \text{ keV}$ -nél s 1,1 keV,  $E\gamma = 121,9 \text{ keV}$  esetén. A detektorok munkatérfoglata eléri a  $40 \text{ cm}^3$ -t.

5. Az általunk kidolgozott nagy felbontóképességű Ge/Li detektor-rendszer számos magfizikai mérésben került alkalmazásra. Ezek közül nehéz ionokkal gerjesztett magnívók élettartamának  $10^{-10} - 10^{-12} \text{ sec}$  intervallumban történő mérése a legjelentősebb, mely a szerző által kidolgozott Ge/Li detektorral vált lehetővé. 1,1 keV felbontóképességű Ge/Li detektor felhasználásával, visszalökött magok esetén Doppler-effektuson alapuló méréssel, kidolgozásra került gerjesztett magnívók élettartam vizsgálatának módszere  $10^{-10} - 10^{-12} \text{ sec}$  tartományban.

6. Meghatároztuk  $^{124}\text{Sn}(^{40}\text{Ar}, 4n)$  és  $^{128}\text{Te}(^{40}\text{Ar}, 4n)$  reakciókban keletkező  $^{160}\text{Er}$  illetve  $^{164}\text{Yb}$  rotációs nivóinak élettartamát. Ezek az eredmények lehetővé tették a rotációs magmodell kísérleti bázisának kiegészítését. A kapott konkrét eredmények jó egyezésben vannak a rotációs magmodellre számított értékekkel.

## IRODALOM

1. Freck D. V., Wakefield J., Nature 193. 669, 1962.
2. Webb P. P., Williams R. L., Nucl. Instr. Meth. 22. 361, 1963.
3. Tavendale A. J., Ewan G. T., Nucl. Instr. Meth. 25. 185, 1963.
4. O. A. Мамвеев, Атомная Энергия 16, 362, 1964.
5. J. M. Hollander, Nucl. Instr. Meth. 43, 65, 1966.
6. Veres Á., Uchrin J., Bedrossián P., Uchrin Gy., Magyar Fizikai Folyóirat 15. 363, 1967.
7. L. Marton, Nuclear Physics Vol. 5. Part A. 1961.
8. Shockley W., Czech J., Phys. B. 11, 81, 1961.
9. C. A. Klein, Phys. Soc. Japan 21 Suppl. 307, 1961.
10. W. Van Roosbroeck, Phys. Rev 139, A 1702, 1965.
11. V. S. Vavilov J., Phys. Chem. Solids 8, 223, 1959.
12. E. Antončík, Czech. J., Phys. 7, 674, 1957. 8, 492, 1958.
13. J. Hodgkinson, 8., Proc. Phys. Soc. 82, 58, 110, 1963.
14. U. Fano, Phys. Rev. 70, 44, 1946.
15. Г. Д. Алхазов, А. А. Воробьев, А. П. Комар, Изв. АН СССР сер. физ. 29, 1227, 1966.
16. G. D. Alkhazov, A. A. Vorob'ev and A. P. Komar, Nucl. Instr. Meth. 48, 1, 1967.
17. H. M. Mann, H. R. Bilger, I. S. Sherman, IEE Trans. NS—13. 3, 252, 1966.
18. H. R. Bilger, Phys. Rev. 163, 238, 1967.
19. C. A. Klein, IEE Trans. NS—15 3, 214, 1968.
20. R. H. Pehl, F. S. Goulding at al. Nucl. Instr. Meth. 59, 45, 1968.
21. E. M. Pell, Phys. Chem. Solids, 3, 1, 74, 1957.
22. E. M. Pell, J. Appl. Phys. 31, 2, 291, 1960.
23. R. B. Hannay (ed): Semiconductors Reinhold, NY. 1959.
24. J. M. Mayer at al, Conf. on Nucl. Electronics NE. 179, 180, 1961 Belgrad.
25. G. S. Fuller, I. C. Severins, Phys. Rev. 96, 21, 1959.
26. Б. И. Болтакс: Диффузия в полупроводниках. Физмат, Москва, 1961.
27. A. Wiezingen, Physika, 22, 849, 1956.
28. J. Takacs, Nucl. Inst. Meth. 33, 171, 1965.
29. С. М. Рыкекин. и др. ДАН СССР, 165, 3, 543, 1965.
30. H. Reiss at al., Bell. Syst. Techn. J. 35, 535, 1956.
31. E. M. Pell, Solid State Physics in Electronics and Telecommunications V. I. AP. NY 1960.
32. H. Reiss, J. Chem. Phys. 21, 7, 1209, 1953.
33. F. J. Morin et al., J. Phys. and Chem. Solids 3, 3, 196, 1957.
34. H. Reiss a. C. S. Fuller, J. Phys. Chem. Solids 4, 58, 1958.
35. R. Weltzin, R. A. Svalin, J. Phys. Soc. Japan 18. Suppl. III. 136, 1963.
36. R. Fox, C. Borkowsky, IRE Trans. NS—9 N° 3, 213, 1962.



37. C. Fuller, J. Ditzemberger, Phys. Rev. 91, 193, 1953.
38. C. Wert., C. Zener, Phys. Rev. 76, 1169, 1949.
39. Б. Болтакс, ЖТФ. 26, 457, 1956.
40. E. M. Pell, J. Appl. Phys. 31, 1675, 1960.
41. W. L. Hansen, B. V. Jarrett, Nucl. Instr. Meth. 31, 183, 1964.
42. G. Cavalleri, G. Fabri, E. Gatti and V. Svelto, Nucl. Instr. Meth. 21, 177, 1963.
43. D. N. Poenaru, IEEE Trans. NS—14, N° 5, 1, 1967.
44. G. L. Miller, W. N. Gibson, Proc. IAEA Conf. on Nucl. El. Belgrade, 1962 p. 476.
- C. A. Ammerlaan et al., Nucl. Instr. Meth. 22, 189, 1963.
45. S. Kalbitzer, Lithium-Drifted Germanium Detectors, Proc. of Panel, Vienna (6—10 June. 133—141, 1966.
46. W. Shockley, Phys. Rev. 91, 228, 1953.
47. A. H. Cottrell, Dislocations and plastic flow in crystals. Clarendon Press, Oxford, 1953.
48. W. Bardsley, Progress in semiconductors, Vol. 4, Heywood, London, 1960.
49. P. Penning, Philips Research Reports 13, 79, 1958.
50. W. T. Read Jr, Phill. Mag. 45, 775, 1954.
51. J. A. Burton, G. W. Hull, F. J. Morin and J. C. Severiens, J. Phys. Chem. 57, 853, 1953.
52. W. Van Roosbroeck and W. Shockley, Phys. Rev. 94, 1558, 1954.
- P. E. Gibbons, P. Iredale, Nucl. Instr. Meth. 53, 1, 1967.
53. Я. Ухрин, Л. Чока. Требования к полупроводниковым гамма спектрометрическим детекторам. Симпозиум — Радиоизотопные приборы и аппаратура для радиоизотопных лабораторий. 3 секция: Дозиметры и детекторы ядерного излучения Лейпциг 1—4 сентября 1970 г. стр. 505—516.
54. Métallurgie Hoboken-Overpelt Olen, Belgium.
55. Sylvania (Subsidiary of General, Telephone a. Electronics) USA.
56. Гиредмет СССР
57. A. J. Tavendale, CM. 45, 4—25.
58. G. T. Ewan, AECL—1960. 1964.
59. Э. З. Рындина, А. Ухрин, Ge/Li/ детекторы 8. № 3, 1966.
60. Я. Ухрин, Л. Чока, Опыт изготовления Ge/Li/ детекторов с большим объемом см. 53, стр. 489—98.
61. Я. Ухрин, Л. Чока, Результаты опытов, полученные в связи с изготовлением детекторов, и их интерпретация. см. 53. стр. 477—88.
62. H. L. Malm, I. L. Fowler, IEEE Trans. NS—13, 62, 1966.
63. F. Cappellani, W. Fumagalli, M. Hemuset, G. Restelli, Nucl. Instr. Meth. 47, 121, 1967.
64. G. T. Ewan, A. J. Tavendale, Nucl. Instr. Meth. 26, 183, 1964.
- Hansen W. L. Jarrett B. V. UCRL—11589.
65. G. Armantrout, IEEE Trans NS—13, 84, 1966.
- C. E. Miner, UCRL—11946, 1965.
66. L. Stab, R. Henck, P. Siffert, A. Coche, Nucl. Instr. Meth. 35, 113, 1965.
- I. Takacs, Nucl. Instr. Meth. 36, 171, 1965.
67. W. Nuyts, R. von Overskaeten, J. Appl. Phys. 42, 5109, 1971.
68. P. R. Wilson, Sol. State. El. 12—1, 1, 1969.
69. P. R. Wilson, Sol. State. El. 12—4, 277, 1969. 12—7, 539, 1969.
70. A. Van der Ziel, Fluctuation phenomena in semiconductors. Butterworths Sci. Publ. 1969.
71. R. L. Heath, W. W. Black, J. E. Cline, Nucleonics 5, 52, 1966.
72. А. Ф. Иоффе, Полупроводниковые термоэлементы. Изд. АН. СССР, 1960.
- С. В. Ненова, Панева, Б. П. Павлович. 13—3701. Дубна, 1968.
73. H. Gunther, R. Kegel, IEEE Trans. NS—15, 392, 1968.
- A. H. Sher, J. A. Coleman, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS—17, 125, 1970.
- A. H. Sher, J. Appl. Phys. 40, 2600, 1969.
- NBS Technical Note 527, 1969.
74. W. L. Hansen, R. H. Pehl et al., Nucl. Instr. Meth. 80, 181, 1970.
75. A. Lauber, Nucl. Instr. Meth. 75, 245, 1969. 71, 77, 1970.
76. G. A. Armantrout, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS—17, 165, 1970.
77. С. Р. Б. В. Новогрудский, А. К. Пустовойт, Н. Б. Строкан, Н. И. Тиснек, Г. А. Шишкина. ФТП, 4, 1039.
78. R. Henck, D. Gutkencht, P. Siffert, IEEE Trans. Nucl. Sci., NS—17, 149, 1970.
79. П. Г. Литовченко, Г. М. Гаверилов, В сб.: Полупроводниковая техника и микроэлектроника, вып. 5, 3. Изд. «Наукова думка» Киев, 1971.



80. П. Г. Литовченко, Г. М. Гаврилов, В. А. Шершель, В сб.: Кремний и германий, вып. 2, 104. Изд. «Металлургия», М. 1970.
81. G. A. Armantrout, UCRL—71625, 1969. July.
82. G. A. Armantrout, Metallurgical Trans. 1, 659, 1970.
83. A. H. Sher, W. J. Keery, NBS Technical Note 571, 16, 1971 April.
84. M. H. Miles, J. Appl. Phys. 40, 2720, 1969.
85. Г. М. Гаврилов, Л. А. Гончаров, П. Г. Литовченко, Э. Е. Петросян, Я. Ухрин, М. В. Чукичев, Исследование некоторых оптических и рекомбинационных характеристик германия, применяемого для изготовления Ge/Li детекторов. Физика и Техника Полупроводников Г. 8. Вый 1. 1974.
86. Б. Д. Копыловский, Заводская лаборатория 3, 1963.
87. Ю. А. Кошевой, ФТТ № 7 Т. I, 1289, 1959.
88. R. L. Heath, W. W. Block, J. E. Cline, IEEE Trans. NS—13, 445, 1976.
89. F. S. Goulding, UCRL—16231, 1965 July.
90. Ю. К. Акимов, А. И. Калинин, В. Ф. Кушнирук, Х. Юнгклаусен, Полупроводниковые детекторы ядерных частиц и их применение. АТОМИЗДАТ. 1967.
91. E. Farstein, J. Hahn, Parts I—III. Nucleonics 23, 9, 11, 1965.  
Part IV—V. Nucleonics 24, 1, 3, 1966.
92. E. Elad, M. Nakamura, IEEE Trans. NS—14, 523, 1967.
93. V. Radeka, BNL—9980, 1966.
94. T. V. Blacock, IEEE Trans. NS—13, 457, 13, 1966.
95. E. Vatai, D. Varga and J. Uchrin, Measurement of the  $\varepsilon/\beta^+$  ratio in the decay of  $^{22}\text{Na}$  and  $^{74}\text{As}$ , Nuclear Physics. A. 116/1968 N° 3 pp. 637—42.  
E. Vatai, D. Varga and J. Uchrin, Measurement of the  $\varepsilon/\beta^+$  ratio of the  $2^- \rightarrow 2^+$  transition of  $^{74}\text{As}$ . Conference on the Electron Capture and Higher Order Processes in Nuclear Decays, Debrecen, Hungary, July 16—18, 1968.
96. Uchrin J., Varga D., Szalay S., Berényi D., Mérések Ge/Li detektorokkal a  $^{145}\text{Sm}$  bomlási sémáján.  
ATOMKI Közlemények 261—65, 9, 1967.  
Д. Берэни, Я. Ухрин, Ф. Молнар, Д. Варга, Исследование распада  $^{145}\text{Sm}$  Совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Рига, 25 янв. — 2 февр. 1968 г.  
D. Berényi, A. Szalay, D. Varga, F. Molnár and J. Uchrin, A Study of decay of  $^{145}\text{Sm}$  by Ge/Li detector techniques.  
Acta Physica Academiae Scientiarum Hungaricae, 28, 431—434, 1970.
97. D. Berényi, D. Varga, J. Uchrin, Investigation of the gamma spectrum in the decay  $^{27}\text{Mg}$  by Ge/Li detector. Acta Physica 24, 237—40, 1968.
98. Györgyi G., Elméleti magfizika MK 1961 Bp.
99. В. Г. Зелевинский, Ядерное вращение и высокие вращательные состояния МИФИ. М. 1974.  
A. Bohr, B. Mottelson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 27, 1953.
100. A. Z. Schwarzschild, E. K. Warburton, Ann. Rev. of Nucl. Sci. 18, 265, 1968.
101. R. M. Diamond, F. S. Stephens, W. H. Kelly, D. Ward, Phys. Rev. Lett. 22, 546, 1969.
102. Э. Е. Берлович, С. С. Василенко, Ю. Н. Новыков, Времена жизни возбужденных состояний атомных ядер, Наука, Ленинград, 1972.
103. R. M. Diamond, F. G. Stephens, W. H. Kelley, Ward, Phys. Rev. Letters. 22, 546, 1969.
104. Я. Ухрин, Детектор с высокой разрешающей способностью. Дубна. ОИЯИ 13—6992, 1972. ЛЯР. стр. 10.
105. Р. Б. Бегжанов, Ф. С. Акифов. Временная спектроскопия атомных ядер. ФАН, Ташкент, 1972.
106. S. Devons, G. Manning, D. St., P. Bunbury, Proc. Phys. Soc. (London) A68 18, 1955.
107. N. Schütz, Thèse, Université de Strassburg 1969.
108. J. F. Shurpely—Schaffer et al. Nucl. Phys. A 167, 602, 1971.
109. J. R. Mc Donald, Science, 167, 1339, 1970.
110. T. K. Alexander, K. W. Allen, Can. J. Phys. 43, 1563, 1965.
111. P. G. Bizetti, A. M. Bizetti-Sona, S. Kalbitzer, B. Povh, Z. Phys. 201, 295, 1967.
112. A. E. Litherland et al., Nucl. Phys. 44, 220, 1963.
113. P. Paul, J. W. Olness, E. K. Warburton, Phys. Rev. 173, 1063, 1968.
114. A. E. Blaugrund, A. Fisher, A. Schwarzschild, Nucl. Phys. A 107, 411, 1968.
115. S. Devons, Nuclear Spectroscopy (Ajzenberg-Sedov F., Ed.) I. Wiley and Son. N. Y. 1960.
116. S. Devons, Electromagnetic lifetimes and properties of nuclear states. NAS-NSS N° 37, 1962.



117. T. K. Alexander, K. W. Allen, O. S. Healy, Phys. Lett. 20, 402, 1965.  
A. Z. Schwarzschild, E. K. Warburton in Annual Rev. of Nucl. Sci. Vol. 18. p. 265.
118. T. K. Alexander, K. W. Allen, and D. C. Healey, Phys. Letters, 20, 402, 1965.
119. P. G. Bizetti, A. M. Bizetti-Sona, S. Kalbitzer and B. Phov, Z. Physik 201, 295, 1967.
120. T. K. Alexander and K. W. Allen, Can. J. Phys., 43, 1563, 1965.
121. Linhard, Proc. Roy. Soc. (London) A311, 11, 1969.
122. K. W. Jones, A. Z. Schwarzschild, E. K. Warburton and D. B. Fossan, Phys. Rev. 178, 1773, 1969.
123. R. M. Diamond, F. S. Stephens, W. H. Kelly and D. Ward, Phys. Rev. Letters, 22, 546, 1969.
124. R. M. Diamond, F. S. Stephens, K. Nakai and R. Nordhagen, Phys. Rev., C3, 344, 1971.
125. K. W. Allen, Lithium-Drifted Germanium Detectors IAEA, 1966. p. 142.
126. R. M. Diamond, F. S. Stephens, K. Nakai, R. Nordhagen, Int. Conf. on Properties of Nuclear States Montreal, 1969.
127. R. M. Diamond, UCRL 19961, 1970.
128. F. S. Stephens, Proc. of the Int. Conf. on Nuclear States (Ed. by Harvey) University of Montreal Press, Montreal, 1969. p. 127.
129. Б. Бочев, С. А. Карамян, Т. Куцарова, Е. Наджанов, В. Г. Субботин, Я. Ухрин, В. А. Чугреев, ОИЯИ, Р6—6229, Дубна, 1972.  
Compt. Rend. Acad. Bulg. Sci. 25, 9050, 1972.
130. Б. Бочев, С. А. Карамян, Т. Куцарова, Е. Наджанов, В. Г. Субботин, Я. Ухрин, В. А. Чугреев, XXII. Сөвешани по ядерной спектроскопии и структура атомного ядра, Киев, 1972.
131. Б. Бочев, С. А. Карамян, Т. Куцарова, Я. Ухрин, Е. Наджанов, Ц. Венкова, Р. Калпакчиева, Ядерная физика 16. вып. 4, 1972. Р7—6415, ОИЯИ, 1972.
132. B. Bochev, S. A. Karamian, T. Kutsarova, E. Nadjakov, J. Uchrin, T. Venkova, R. Kalpakchieva, High spin nuclear states and related phenomena. Stockholm May. 1972. (Conf. on)
133. J. O. Newton, F. S. Stephens, R. M. Diamond, W. H. Kelly, D. Ward, Nucl. Phys. A141, 631, 1970.  
J. O. Newton, F. S. Stephens, R. M. Diamond, R. Kotajima, E. Matthias, Nucl. Phys. A95 357, 1967.  
K. W. Jones, A. Z. Schwarzschild, E. K. Warburton, W. H. Kelly, D. Ward, Phys. Rev. 178, 1773, 1969.  
R. Nordhagen, G. Goldring, R. M. Diamond, K. Nakai, F. S. Stephens, Nucl. Phys. A142, 577 1970.
134. Л. Александров, Журнал выч. матем. и матем. физ. II. № I, 1971.
135. Л. Александров, ОИЯИ Р5—5515, Дубна, 1971. Сборник «Гамма—лучи» Изд. АН. СССР. гл. I, 1961.

# A TARDIONOK ÉS TACHIONOK KÖZÖTTI FELTÉTELEZETT SZIMMETRIA KÖVETKEZMÉNYEI

MÉSZÁROS ATTILA

Bemutató Csillagvizsgáló  
Prága, Csehszlovákia

A feltételezett szimmetriából többek között az következik, hogy a tér a fényentúli részecskék mozgásának leírásakor anizotrop, konkrét esetektől függően megmagyarázhatók egyes kauzalitásértő paradoxonok s a természetben valószínűleg nagyon nagy a tardion-tachion szeparáció.

## BEVEZETŐ

Az  $S$  inerciarendszerben az energia  $E$  és az impulzus  $\vec{p}$  között egy  $E_0$  nyugalmi energiájú részecske esetében fennáll az

$$E^2 - |\vec{p}|^2 \cdot c^2 = E_0^2 \quad (1)$$

összefüggés, ahol  $c$  a fény vákuumbeli sebessége. Legyen a részecske sebessége  $S$ -ben  $\vec{v}$ . Érvényes:

$$\frac{\vec{v}}{c} = \frac{c\vec{p}}{E} = \frac{c\vec{p}}{+ \sqrt{E_0^2 + |\vec{p}|^2 \cdot c^2}} \quad (2)$$

A természetben a részecskék három osztálya létezhet: tardionok ( $E_0^2 > 0$ ), luxonok ( $E_0 = 0$ ) és tachionok ( $E_0^2 < 0$ ). A (2)-ből következik, hogy a három osztálynál az előbbi sorrendben fennáll:

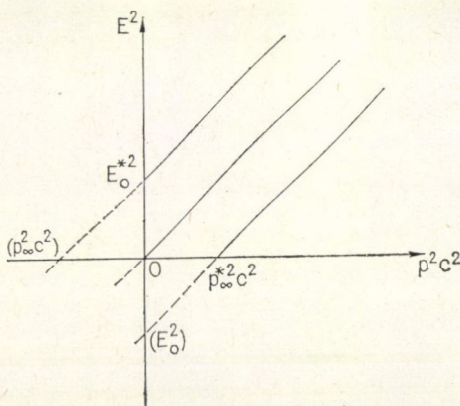
$$|\vec{v}| < c, \quad |\vec{v}| = c, \quad |\vec{v}| > c. \quad (3)$$

A tachionoknál, ha  $v \rightarrow \infty$  és  $E \rightarrow 0$ , akkor az impulzus abszolút értéke minimális. Nevezzük el ezt az impulzust „impulzusnak végtelen sebességnél” ( $\vec{p}_\infty$ ). (1)-ből az következik, hogy

$$-E_0^2 = |\vec{p}_\infty|^2 \cdot c^2. \quad (4)$$

Ábrázoljuk (1)-et (1. ábra) egy  $E^2$ ,  $p^2 c^2$  tengelyű derékszögű koordináta-rendszerben egy  $E_0^* > 0$  nyugalmi energiájú tardion, egy luxon és egy tachion esetében, melynek az impulzusa végtelen sebességnél

$$cp_\infty^* = E_0^*. \quad (5)$$



1. ábra



Mindhárom részecske összes lehetséges állapotának egy félegyenes felel meg a jobb felső síknegyedben, mert csak ekkor reális az energia és az impulzus. Az impulzus végtelen sebességnél a tachion ill. a nyugalmi energia a tardion esetében egymásnak megfelelő fogalmak. A tardion impulzusa végtelen sebességnél és a tachion nyugalmi energiája fizikai tartalommal nem rendelkezik. A tachion végtelen sebességének tehát a tardion nyugalma felel meg. Az 1. ábra szimmetrikus az  $E^2 = p^2 c^2$  félegyenes szerint az (5) feltétel miatt.

Fogadjuk el axiómaként („szimmetriaaxióma”, a továbbiakban SZA), hogy a tachionok és a tardionok között tökéletes a szimmetria. Ez azt jelenti, hogy egy fiktív fénysebességgel mozgó megfigyelő számára nincsen különbség a tachionok és a tardionok között. Nem létezik olyan sajátosság az egyik osztálynál, mely nincs meg a másiknál. Egyetlen tulajdonság se különbözteti meg a tardionok osztályát a tachionokétól. Avagy egy kissé másképp fogalmazva (a homályos „fénysebességgel mozgó megfigyelő” fogalmának kikerülése végett): Egy a fénynél lassabban mozgó megfigyelőnek a tachionok összes sajátossága ugyanolyannak tűnik, mint egy a fénynél gyorsabb megfigyelőnek a tardionoké.

Mivel kétféle tardion létezik (tardion és antitardion), SZA szerint tachion is kétféle van (tachion és antitachion). A tardionok és az antitardionok összes tulajdonsága nem feltétlenül szükséges, hogy azonos legyen. SZA szerint így lesz a tachionok és az antitachionok sajátosságainál is. Az SZA már akkor is teljesül, ha csupán a tardionok és az antitachionok ill. a tachionok és az antitardionok sajátosságai között nincsen különbség (kombinált szimmetria).

Ebben a munkában lényegében csak a részecskék kinematikájáról, energiájáról és impulzusáról lesz szó. A kombinált szimmetria helyett elég a „tardion-tachion szimmetria” formula is. Csupán annyit szükséges feltételezni, hogy nyugalmi energiában ill. impulzusban végtelen sebességnél egy részecske-antirészecskepárnál nincsen a részecske és az antirészecske értéke között eltérés.

Nem állítható, hogy a természetben teljes mértékben igaz az SZA. Mindemellett figyelemreméltó, milyen következményei vannak ennek az egyszerű feltételnek.

### 1. A téridőkoordináták transzformációja a végtelen sebességű inerciarendszerbe

Legyen adva két inerciarendszer  $S$  és  $S'$ . A téridőkoordináták bennük úgy vannak választva, hogy közöttük fennáll a speciális Lorentz-transzformáció

$$x'_1 = \gamma_v \left( x_1 + \frac{iv}{c} x_4 \right), \quad x'_2 = x_2, \quad i = \sqrt{-1}, \quad \gamma_v = \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (1.1)$$

$$x'_4 = \gamma_v \left( x_4 - \frac{iv}{c} x_1 \right), \quad x'_3 = x_3, \quad x'_4 = ict', \quad x_4 = ict, \quad \operatorname{tg} \psi = \frac{v}{c},$$

ahol  $t$  és  $t'$  az idő a két rendszerben,  $v$   $S'$  sebessége  $S$ -hez képest ( $0 < |v| < c$ ) és  $\psi$  az  $S'$  kezdőpontjának világvonala és az  $x_4$ -es tengely közötti szög.

Az SZA szerint a fénynél lassúbb inerciarendszerekhez hasonlóan (tardionrendszerek) be kell vezetnünk a fénynél sebesebb inerciarendszerek (tachionrendszerek) fogalmát is. Az inerciarendszerek e két osztálya sajátosságaiban megegyezik.



Kövessük figyelemmel az  $S' \equiv S^\infty$  inerciarendszert, melynél  $|v| = \infty$ . Ekkor  $\psi = \frac{\pi}{2}$ .

Már a bevezetőből tudjuk, hogy a végtelen sebesség a tachionnál és a nyugalom a tardionnál egymásnak megfelelő fogalmak. SZA szerint tehát  $S^\infty$  összes sajátossága az  $S$  kezdőpontjában levő megfigyelőnek (a továbbiakban minden inerciarendszernél a „kezdőpontjában levő” részt kihagyjuk) ugyanolyan, mint  $S$ -é az  $S^\infty$  megfigyelőnek.

Mivel az  $x_4 = x_4^\infty = 0$  időpontban a két rendszer origója közös, a sebességeknél fogva  $S^\infty$  origójának világvonala az  $x_1$  tengely,  $S$  kezdőpontjává az  $x_4$  tengely. Mivel  $S$  kezdőpontjának világvonala az  $S$ -beni időtengely, SZA miatt  $x_1$  kell hogy legyen az  $S^\infty$ -beni időtengely! Így  $S^\infty$ -ben az az időkoordináta, ami  $S$ -ben térirány és fordítva!

Megjegyzendő, hogy az  $S$  megfigyelő azon kérdésére, vajon  $S^\infty$  kezdőpontja melyik irányban mozog az  $x_1$ -es tengely mentén, nincs válasz. Hasonlóképp arra a kérdésre, vajon  $S$  kezdőpontja a  $+x_4$ -es irányban mozog-e avagy ellenkezőleg, nincs felelet. Valójában ezeknek a kérdéseknek nincs is fizikai tartalmuk. A végtelen sebességű inerciarendszer nem térbeli mozgást végez, hanem az „ideje telik” és ezért mozgásirányról beszélni nem a legkorrektebb. Mivel azonban az  $S$ -beni idő, mondjuk így, „folyása” az  $S^\infty$  megfigyelő szerint mégiscsak térirányú változás (hasonlóan az  $S^\infty$  időtengelye  $S$ -ben térkoordináta), bevezetjük a mozgásirány fogalmát a végtelen sebességeknél is. Definitorikusan kijelentjük, hogy  $S$  origója az  $S^\infty$  megfigyelő szerint abban az irányban mozog, mely irányban  $S$ -ben a jövő van. Hasonlóan  $S^\infty$  kezdőpontjának mozgásiránya az  $S$  megfigyelőnek azonos az  $S^\infty$ -beni jövővel (2. ábra).

(Elvben  $S^\infty$  mozgásirányát  $S$ -ben és  $S$ -ét  $S^\infty$ -ben ellenkezőleg is lehetne definiálni. Ez azonban fölösleges bonyodalmakhoz vezetne. Pl.: Legyen igaz, hogy  $S$  és  $S^\infty$  az  $x_4^\infty = x_4 = 0$  időpontban keletkezett. Ekkor az origók világvonala az  $x_4 \geq 0$  ill. az  $x_1 \geq 0$  félegyenesek. Mivel a definíció szerint pl.  $S$  kezdőpontja az  $S^\infty$  megfigyelő szerint a jövővel ellenkező irányban mozog (tehát a  $-x_4$  irányában), a mozgásirányból következtetve az  $S^\infty$  megfigyelő szerint  $S$  az  $x_4 = x_4^\infty = 0$  időpontban megsemmisül. Hasonlóan  $S^\infty$  is az  $S$  megfigyelő szerint az  $x_4^\infty = x_4 = 0$  eseménykor megsemmisül. Ezt a definíciót a továbbiakban elkerüljük.)

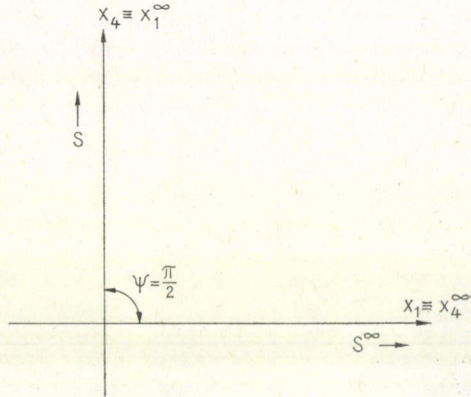
Érvényes-e a Lorentz-transzformáció  $v = \infty$ -re? (1.1)  $v \rightarrow \infty$  határértékeként az

$$x_1^\infty = x_4, \quad x_4^\infty = -x_1, \quad x_2^\infty = x_2, \quad x_3^\infty = x_3 \quad (1.2)$$

transzformációt kapjuk, mely helytelen  $x_4^\infty$  rossz előjele miatt. Az  $S$ -beni jövő  $+x_4$   $S^\infty$ -ben a  $+x_1^\infty$  tengely, s definíciónk szerint ez  $S$  kezdőpontjának mozgásiránya is  $S^\infty$ -ben. SZA szerint ugyanígy az  $S^\infty$ -beni jövő  $S$ -ben a  $+x_1$  tengely lesz. A helyes transzformáció tehát az  $S \rightarrow S^\infty$  átmenetkor (lásd a 2. ábrát).

$$x_1^\infty = x_4, \quad x_4^\infty = x_1, \quad x_2^\infty = x_2, \quad x_3^\infty = x_3. \quad (1.3)$$

Ezek szerint a Lorentz-transzformáció úgy érvényes  $v = \infty$ -re, hogy a transzformációval együtt időinverziót is végrehajtunk.



2. ábra



## 2. A konjugált inerciarendszer

$S + x_1$  irányában mozgó végtelen sebességű  $S^\infty$  inerciarendszert (melyben tehát  $+x_1 \equiv +x_4^\infty$  a jövő) nevezzük el  $S + x_1$  irányú konjugált inerciarendszerének.  $S^\infty x_1^\infty$  és  $x_4^\infty$  tengelyeit  $S x_1$  és  $x_4$  tengelyeinek  $+\frac{\pi}{2}$  szöggel való elforgatásával s idő-inverzióval kapjuk meg. Ezt az operációt konjugálásnak fogjuk hívni. Melyik rendszer  $S^\infty$  konjugáltja? Két lehetőség van:

a)  $(S^\infty)^\infty \equiv S$ , vagyis a második konjugálásakor a forgatás  $-\frac{\pi}{2}$  szöggel történik. Ez esetben kijelenthető, hogy a konjugálás lényegében mindig  $1 \leftrightarrow 4$  indexcsere, mert

$$x_1^\infty = x_4, \quad x_4^\infty = x_1, \quad (x_1^\infty)^\infty = x_1, \quad (x_4^\infty)^\infty = x_4. \quad (2.1)$$

b)  $(S^\infty)^\infty \equiv S^-$ , ahol  $S^-$ -t  $S$ -ből az  $x_1$ -es és  $x_4$ -es tengelyek inverziójával kapjuk meg. Ez esetben a konjugálás mindig  $+\frac{\pi}{2}$ -vel való forgatást jelent. Érvényes

$$(S^-)^\infty \equiv (S^\infty)^-, \quad ((S^\infty)^-)^\infty \equiv S \quad (2.2)$$

avagy szétírva a tengelyekre

$$\begin{aligned} x_1^\infty &\equiv x_4, \quad (x_1^\infty)^\infty \equiv -x_1, \quad (-x_1)^\infty \equiv -x_4, \quad (-x_4)^\infty \equiv x_1 \\ x_4^\infty &\equiv x_1, \quad (x_4^\infty)^\infty \equiv -x_4, \quad (-x_4)^\infty \equiv -x_1, \quad (-x_1)^\infty \equiv x_4. \end{aligned} \quad (2.3)$$

A további eszmefuttatásokra nincs hatással, melyik konjugációval számolunk.

Minden  $S$  inerciarendszerhez ( $S$  lehet tardion- és tachionrendszer is) egy és csakis egy konjugált rendszer tartozik. Legyen ugyanis igaz, hogy egy kiválasztott  $S$  inerciarendszerhez  $r$  különböző konjugált rendszer tartozik (pl. minden térirányban egy, ekkor  $r=\infty$ ), ahol  $r$  nem negatív reális szám. SZÁ szerint az összes konjugáltrendszerhez további  $r$  konjugáltrendszer tartozik, ami  $r \neq 1$  esetében ellentmondás. Ez viszont azt jelenti, hogy minden  $S$  inerciarendszerben van egy térirány, a konjugált rendszer mozgásának iránya. Ez az irány objektív tény, a  $+x_1$  tengelyt lehet ebben az irányban választani. A továbbiakban mindig ezt tesszük.

Megjegyzendő, hogy a relativitáselméletben a képzetes idő helyett gyakori a reális idő használata is. Legyen  $x^0 = ct$ . Ekkor  $S$  két téridőtengelye a  $v \rightarrow \infty$  transzformáció és az időinverzió után

$$(x^0)^\infty \equiv -ix^1, \quad (x^1)^\infty \equiv ix^0, \quad (2.4)$$

$S^\infty$  tengelyei tehát nem ábrázolhatók  $S$ -ben. A tachionrendszerek jellemzésekor ezért a képzetes idő használata elkerülhetetlen.

## 3. A téridő képzetes térkoordinátákkal

Egy tardion (vagy tachion) világvonalának leírása egy inerciarendszerben ugyanolyan kell, hogy legyen, mint egy tachion (vagy tardion) világvonalának leírása a konjugált rendszerben, mert másképp nem teljesül az SZÁ.

Legyen adva egy  $A$  részecske, mely az  $S = S^\infty$  ( $x_4 = x_4^\infty = 0$ ) eseménykor a közös



kezdőpontban volt. A világvonala  $S$ -ben ill.  $S^\infty$ -ben

$$A \equiv \left[ \frac{dx_1}{dx_4}, \frac{dx_2}{dx_4}, \frac{dx_3}{dx_4}, 1 \right] \cdot x_4 = \left[ 1, \frac{dx_2}{dx_1}, \frac{dx_3}{dx_1}, \frac{dx_4}{dx_1} \right] \cdot x_1 = \\ = \left[ 1, \frac{dx_2^\infty}{dx_4^\infty}, \frac{dx_3^\infty}{dx_4^\infty}, \frac{dx_1^\infty}{dx_4^\infty} \right] \cdot x_4^\infty, \quad (3.1)$$

mivel

$$x_4 = \frac{dx_4}{dx_1} \cdot x_1. \quad (3.2)$$

A szögletes zárójelben az  $S$ -beni koordinátákkal való felírásnál az első három tag  $A$  három sebességkomponense  $ic$ -vel osztva. A negyedik fizikai tartalma miatt „idősebességnek” nevezhető. Az így kapott számnégyes tetszőleges  $x_4$ -re  $A$  téridőkoordinátáit adja. Mivel  $S^\infty$ -ben az  $x_4^\infty \equiv x_1$  az időkoordináta, az  $S^\infty$  megfigyelőnek a harmadik felírás szögletes zárójelében az első komponens az idősebesség. Ez már a felírás alakjából is azonnal következik. A másik három számára  $A$  három sebességkomponense  $ic$ -vel osztva.

Mivel az  $x_2$ -es tengely bármely  $x_1$ -re merőleges irányban választható, legyen  $A$  világvonala az  $x_3=0$  síkban. Ebben a fejezetben ezért az  $x_3$ -as koordinátákat a továbbiakban nem írjuk ki.

a)  $A$  legyen tardion. Az összes lehetséges helyét a téridőben egy  $x_4=x_4^*$  koordináta esetében a 3. ábra I. része adja meg. Ugyanis  $A$  képzetes ívhossza miatt érvényes

$$0 \leq U^2 = \left( \frac{u_1}{c} \right)^2 + \left( \frac{u_2}{c} \right)^2 < 1, \quad (3.3)$$

ahol

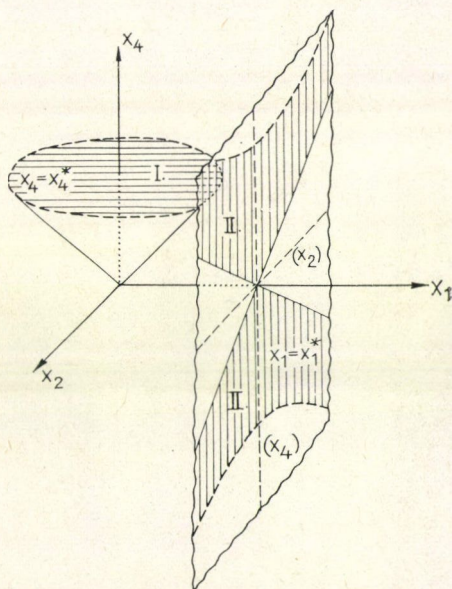
$$u_j = ic \frac{dx_j}{dx_4} \quad j = 1, 2. \quad (3.4)$$

$U^2 > 0$  egy körvonalat definiál az  $x_4=x_4^*$  síkban. Az I. rész az  $U=0$  pont és a  $0 < U^2 < 1$  körvonalak halmaza. Mivel  $u_1$  és  $u_2$  reális, az  $U^2 < 0$  képzetes körvonalaknak nincsen fizikai tartalmuk, hiába képzetes ez esetben is az ívhossz. (3.3)-ban az alsó határt ebből kaptuk.

b) Legyen most  $A$  tachion, Mivel  $A$  világvonala (itt  $u_j$  helyett  $w_j$ -t írunk, ahol  $j=1, 2$ )

$$A \equiv \left[ 1, \frac{dx_2}{dx_1}, \frac{dx_4}{dx_1} \right] \cdot x_1 = \left[ 1, \frac{w_2}{w_1}, \frac{ic}{w_1} \right] \cdot x_4^\infty, \quad (3.5)$$

egy tetszőleges  $x_4^\infty \equiv x_1 = x_1^*$  koordináta esetében a 3. ábrán a II. rész adja meg  $A$  összes



3. ábra



lehetséges helyét a téridőben. A reális ívhossz miatt

$$0 \leq W^2 = \left(\frac{c}{w_1}\right)^2 - \left(\frac{w_2}{w_1}\right)^2 < 1. \quad (3.6)$$

Ez a feltétel az  $x_1 = x_1^*$  síkban  $0 < W^2 < 1$  esetében hiperbola.  $W=0$  magukat az aszimptótákat ( $x_1 = \pm x_2$ ) határozza meg. A  $d$ ) esetről megmutatjuk, hogy a  $W^2 < 0$  hiperboláknak nincs fizikai tartalmuk.

A 3. ábra szerint egy tachion világvonala  $S^\infty$ -ben látszólag másképp íródik le, mint egy tardioné  $S$ -ben. Ennek az oka az, hogy az  $x_2$  tengely reális. Írjuk le  $A$  világ-vonalát olyan koordinátarendszerben, melyben  $x_1$ ,  $ix_2$  és  $x_4$  a koordinátatengely.

c) Legyen  $A$  tardion. A világvonala ( $u'_j$  (3.4) szerint van definiálva,  $j=1, 2$ )

$$A \equiv \left[ \frac{dx_1}{dx_4}, \frac{dix_2}{dx_4}, 1 \right] \cdot x_4 = \left[ \frac{u'_1}{ic}, \frac{u'_2}{c}, 1 \right] \cdot x_4. \quad (3.7)$$

A képzetes ívhossz miatt

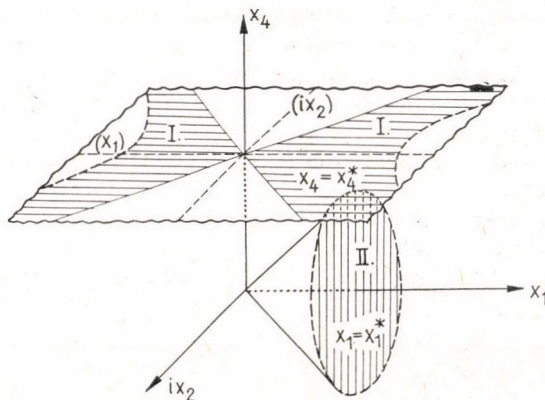
$$0 \leq (U')^2 = \left(\frac{u'_1}{c}\right)^2 - \left(\frac{u'_2}{c}\right)^2 < 1. \quad (3.8)$$

$A$  összes lehetséges helyét egy  $x_4 = x_4^*$  koordináta esetében a 4. ábrán az I. rész szemlélteti. A  $0 < U'^2 < 1$  feltétel az  $x_4 = x_4^*$  síkban egy hiperbolát határoz meg.  $U'=0$  az  $x_1 = \pm ix_2$  aszimptótákat adja. Az  $a$ ) eset minden  $0 < U^2 < 1$  körvonalának egy és csak egy  $0 < U'^2 < 1$  hiperbola felel meg, míg az  $U=0$  pontnak az  $U'=0$  aszimptóták. Az  $U^2 < 0$  képzetes körvonalaknak az  $U'^2 < 0$  hiperbolák a megfelelőik, s ezért ezek fizikai tartalom nélküliek. (3.8)-ban az alsó határt innét kaptuk.

d) Legyen most  $A$  tachion. A világvonala ( $u'_j$  helyett  $w'_j$ -t írunk,  $j=1, 2$ )

$$A \equiv \left[ 1, \frac{dix_2}{dx_1}, \frac{dx_4}{dx_1} \right] \cdot x_1 = \left[ 1, \frac{iw'_2}{w'_1}, \frac{ic}{w'_1} \right] \cdot x_4^\infty. \quad (3.9)$$

Egy  $x_1 = x_1^*$  koordináta esetében  $A$  összes lehetséges helye a 4. ábrán a II. rész, mely a  $0 < W'^2 < 1$  körvonalak és a  $W'=0$  pont halmaza. A reális ívhossz miatt ugyanis ér-



4. ábra



vényes

$$0 \leq W'^2 = \left(\frac{w'_2}{w'_1}\right)^2 + \left(\frac{c}{w'_1}\right)^2 < 1. \quad (3.10)$$

Mivel  $w'_1$  és  $w'_2$  reális, a  $W'^2 < 0$  képzetes körvonalaknak nincsen fizikai tartalmuk. (3.10)-ben az alsó határt innét kapjuk. Minden  $0 < W'^2 < 1$  körvonalnak a  $b$ ) esetén egy és csakis egy  $0 < W^2 < 1$  hiperbola felel meg, míg a  $W' = 0$  pontnak a  $W = 0$  aszimptóták. Mivel a  $W'^2 < 0$  képzetes körvonalak megfelelői a  $b$ ) esetén a  $W^2 < 0$  hiperbolák, ezeknek ott nincs fizikai tartalmuk. (3.6)-ban az alsó határt ebből kaptuk.

Megmutattuk, hogy egy tardion (tachion) világvonala  $S$   $x_1, x_2, x_4$  tengelyű koordinátarendszerében ugyanúgy íródik le, mint egy tachion (tardion) világvonala  $S^\infty$   $x_1, ix_2, x_4$  tengelyű rendszerében. Az SZÁ tehát úgy igazolódik, hogy az  $S \rightarrow S^\infty$  átmenetkor az  $x_2 \rightarrow ix_2$  cserét is végrehajtjuk. A tachion világvonalának leírása  $S^\infty$ -ben egyszerűbb az  $x_1, ix_2, x_4$  tengelyek segítségével, akárcsak a tardioné  $S$ -ben az  $x_1, x_2, x_4$  tengelyekkel. Mindamellettt nyugodtan használható  $x_2$   $S^\infty$ -ben a tachion ill.  $ix_2$   $S$ -ben a tardion esetében is, de ekkor bizonyos megszorításokat kell alkalmaznunk. A tachion esetében ezt (3.6)-ból kapjuk, mely szerint

$$|w_2| \leq c, \quad \left| \frac{dx_2}{dx_1^\infty} \right| \leq 1. \quad (3.11)$$

Ugyanígy a tardionnál az  $ix_2$ -es tengely esetében (3.8)-ból

$$|u'_2| \leq |u'_1|, \quad \left| \frac{dx_2}{dx_1} \right| \leq 1 \quad (3.12)$$

$S$ -ben az  $x_2$ -es tengely használatakor a tachion ill.  $S^\infty$ -ben az  $ix_2$ -es tengely használatakor a tardion világvonalának leírásakor az előbbi két feltétel változatlanul érvényes, csupán a  $|dx_1^\infty|$ , ill.  $|dx_1|$  helyett  $|dx_4|$  ill.  $|dx_4^\infty|$  írandó.

A  $|w_2| \leq c$  feltétel, mivel az  $x_2$ -es tengelyt speciálisan választottuk, valójában azt mondja, hogy a tachionnál az  $x_1$ -re merőleges sebességkomponens nem nagyobb  $c$ -nél. Ha tehát  $x_2$  iránya tetszőleges, ez azt jelenti, hogy

$$w_2^2 + w_3^2 \leq c^2 \quad (3.13)$$

melyből az is következik, hogy  $w_1 \neq 0$ , mivel  $w^2 = w_1^2 + w_2^2 + w_3^2 > c^2$ . Az  $x_3$ -as tengelyről ugyanaz elmondható, amit már  $x_2$ -ről elmondtunk. Pl. a tachionok esetében egyszerűbb az  $ix_2$  és az  $ix_3$  tengelyek használata, de a (3.13) feltétel mellett nyugodtan használható  $x_2$  és  $x_3$  is.

Elvben lehetséges egy részecske világvonalát  $x_2$  és  $ix_3$  (vagy  $ix_2$  és  $x_3$ ) tengelyű rendszerben is leírni. Ez azonban egyenlő mértékben és fölöslegesen komplikált a részecskék mindkét osztályánál.

Elmondható tehát, hogy egy tetszőleges  $S$  inerciarendszerben a konjugált rendszer mozgásiránya alapjaiban különbözik a többi iránytól, ha a fényentűli részecskék (tardionrendszerben a tachion, tachionrendszerben a tardion a fényentűli részecske) mozgását írjuk le benne. A tér a fényentűli részecskék leírásakor anizotrop.



Végül nézzük az általános esetet, amikor  $A$  nem volt az  $x_4 = x_4^\infty = 0$  pillanatban a közös kezdőpontban. A világvonala  $S$ -ben és  $S^\infty$ -ben

$$\begin{aligned} A &\equiv \left[ \frac{dx_1}{dx_4}, \frac{dx_2}{dx_4}, \frac{dx_3}{dx_4}, 1 \right] \cdot x_4 + [x_1^0, x_2^0, x_3^0, 0] = \\ &= \left[ 1, \frac{dx_2^\infty}{dx_4^\infty}, \frac{dx_3^\infty}{dx_4^\infty}, \frac{dx_1^\infty}{dx_4^\infty} \right] \cdot x_4^\infty + [0, x_2^{00}, x_3^{00}, (x_1^\infty)^{00}], \end{aligned} \quad (3.14)$$

ahol  $[x_1^0, x_2^0, x_3^0, 0]$  a világvonal metszéspontja az  $x_4 = 0$  hiperfelülettel, míg a világvonal metszéspontja az  $x_1 \equiv x_4^\infty = 0$  hiperfelülettel a  $[0, x_2^{00}, x_3^{00}, (x_1^\infty)^{00}]$  pont.

Fennáll:

$$\frac{dx_4}{dx_1} = -\frac{(x_1^\infty)^{00}}{x_1^0} \quad x_j^{00} - x_j^0 = \frac{dx_j}{dx_4} \cdot (x_1^\infty)^{00} \quad j = 2, 3. \quad (3.15)$$

#### 4. A Lorentz-transzformáció általánosítása a fényentúli sebességekre

Legyen adva egy  $S$  tardionrendszer, melyben a  $+x_1$  tengelyt a konjugált rendszer mozgásirányában választottuk. Egy tetszőleges további  $S'$  tardionrendszer  $0 < v < c$  sebességgel mozog  $S$ -hez képest, miközben a sebesség iránya  $0 \leq \vartheta \leq \pi$  szöget zár be a  $+x_1$  tengellyel.  $S'$ -ben a  $+x'_1$  tengelyt  $S'$  konjugált rendszerének mozgásirányában választottuk. Milyen  $x'_1$  térbeli helyzete  $x_1$ -hez viszonyítva?

Elvben  $x'_1$  a tér bármely irányába mutathat. Foglalkozzunk csupán a legegyszerűbb esetekkel.

Mindenekelőtt tételezzük fel, hogy  $\vartheta = 0$  vagy  $\vartheta = \pi$  esetében, miközben a két rendszer kezdőpontja egy adott pillanatban közös is, a térben  $x_1 \equiv x'_1$ . Ekkor  $S$  és  $S'$  között fennáll az (1.1)-es transzformáció ( $\vartheta = \pi$  esetében  $v < 0$ ), melyet mint forgatást szokás ábrázolni  $\varphi$  szöggel az  $x_1 x_4$  síkban  $\left( \operatorname{tg} \varphi = i \frac{v}{c} \right)$ . Tökéletesen azonos transzformáció érvényes  $S^\infty$  és  $S'^\infty$  téridőkoordinátái között is, ha végrehajtjuk az

$$x_1^\infty = x_4, \quad x_4^\infty = x_1, \quad x_1'^\infty = x'_4, \quad x_4'^\infty = x'_1 \quad (4.1)$$

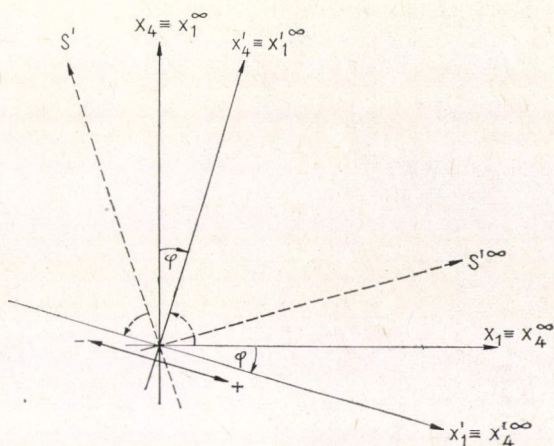
cseréket (1.1)-ben. Az 5. ábra a  $v < 0$  esetet szemlélteti.

$S'^\infty$   $S$ -hez viszonyított sebessége  $w = -\frac{c^2}{v} \cdot S'^\infty$  téridőkoordinátáit  $S$  koordiná-

táiból úgy kapjuk meg azonnal, hogy az (1.1)-es transzformációban  $w = -\frac{c^2}{v}$  sebességet használunk, s ráadásul időinverziót. Így tehát bármilyen  $x_1$ -es félegyenes irányában mozgó inerciarendszerbe ismerjük a téridőkoordináták transzformációját. (1.1) jó a fénynél nagyobb sebességekre is, csupán ekkor ráadásul időinverziót is végre kell hajtani.

Megjegyzendő, hogy egy  $S''$  tachionrendszer, melynek sebessége  $v < 0$  és  $|v| > c$ , nem a  $-x_1$  irányában mozog, hanem pont ellenkezőleg, a  $+x_1$  irányba s a kvázimúltba (6. ábra).  $S^\infty$ -ben  $x_4^\infty \equiv x_1$  a jövő, s  $S''$  tengelyeit  $\frac{\pi}{4}$  szögnél kisebb forgatással





5. ábra

kapjuk meg  $S$  tengelyeiből. (1.1) ekkor úgy jó, hogy az  $x_1$ -es koordinátánál alkalmazunk inverziót. Az 5. és 6. ábrán szemléltetésként bejelöltük  $S'^\infty$  ill.  $S''$  világvonalát s ezek tengelyeit is.

A Lorentz-transzformációról tehát elmondható: Ha egy  $S''$  inerciarendszer az  $S'$  inerciarendszerhez képest az  $x_1$ -es tengely irányában a fénynél sebesebben mozog, a téridőkoordináták transzformációját az  $S \rightarrow S''$  átmenetkor ajánlatos két lépésben végrehajtani. Először az  $S \rightarrow S^\infty$ -t, majd az  $S^\infty \rightarrow S''$ -t. A második transzformációnál semmiféle inverzió nem fordul elő. Avagy másképp mondva, a  $\frac{\pi}{4}$  szögnél kisebb forgatás esetében a tengelyek orientációja nem változik.

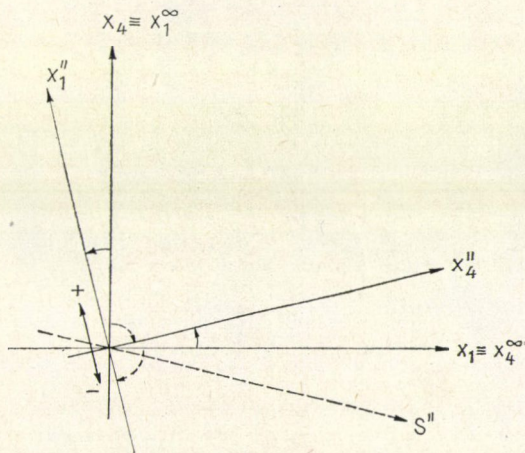
Nézzük most az általános esetet. Tetszőleges  $0 < \vartheta < \pi$  szög esetében a lehető legegyszerűbb esetek a következők:

a) Minden  $0 \leq \vartheta \leq \pi$ -re  $x_1$  párhuzamos és azonos orientációjú  $x_1'$ -vel.

b) Létezik a térben egy  $d$  egyenes, melyre bármilyen  $S'$  tardionrendszer  $x_1'$ -je merőleges és van vele metszéspontja. Az  $x_1$ -es tengelyek orientációja a  $d$  egyenesbe vagy -ből irányul.

c) Létezik a térben egy  $P$  pont, melyben az  $x_1$ -es tengelyek metszik egymást, s az orientációjuk a pontba vagy -ből irányul.

Foglalkozzunk részletesebben a c), „-ből” esettel.

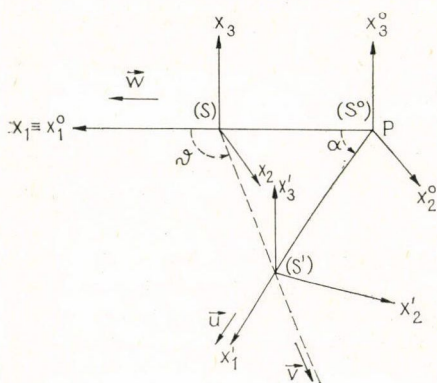


6. ábra



Válasszunk egy  $P$  kezdőpontú  $S_0$  koordinátarendszert a 7. ábra szerint.  $P$  fénynél kisebb sebessége  $S$ -ben  $-w$ ,  $S'$ -ben  $-u$ . Az  $x_1$  és  $x'_1$   $0 < \alpha < \pi$  szöget zár be. Érvényes:

$$\begin{aligned} x_1^0 &= \gamma_w \left( x_1 - \frac{iw}{c} x_4 \right), & x'_1 &= \gamma_u \left( x_1^0 \cos \alpha + x_2^0 \sin \alpha + \frac{iw}{c} x_4 \right), \\ x_2^0 &= x_2, & x'_2 &= -x_1^0 \sin \alpha + x_2^0 \cos \alpha, \\ x_3^0 &= x_3, & x'_3 &= x_3^0, \\ x_4^0 &= \gamma_w \left( x_4 + \frac{iw}{c} x_1 \right), & x'_4 &= \gamma_u \left( x_4^0 - \frac{iw}{c} (x_1^0 \cos \alpha + x_2^0 \sin \alpha) \right) \end{aligned} \quad (4.2)$$



7. ábra

$S$ -ből  $S'$ -be a közvetlen transzformációt (4.2)-ből kapnánk. Nem nehéz kifejezni  $v$ -t  $w$  és  $u$  segítségével ill.  $\vartheta$ -t  $\alpha$  által.

Egy tetszőleges  $S''$  tachionrendszerbe ezekután a téridőkoordináták transzformációja nem nehéz. Elég először az  $S \rightarrow S''$  transzformációt véghezvinni (4.2) szerint, majd az így kapott koordinátákat konjugálni.

Ami a tardionrendszerekre érvényes, fennáll a tachionrendszerekénél is. Az  $x_1$ -es tengelyeik szintén egy pontban metszik egymást ( $P^\infty$ ).

A  $P$  pont mozgását minden inerciarendszerben le tudjuk írni, kivéve  $S_0^\infty$ -t. Pl.

$S^\infty$ -ben a  $+x_1^\infty$  irányában halad a kvázimúltba  $\frac{c^2}{|w|}$  sebességgel. A  $P^\infty$  mozgása szin-

tén leírható minden inerciarendszerben, kivéve  $S_0$ -t. Pl.  $S'$ -ben  $\frac{c^2}{|u|}$  sebességgel mozog a  $+x'_1$  irányában a kvázimúltba.

Végül megjegyzendő, hogy a téridőkoordináták általános transzformációja ismeretében nem probléma transzformálni ezek származékait se (pl. (3-1)-nél a szögletes zárójelben levő számnégyeseket).

## 5. A tachionok és a kauzalitás

Legyen adott egy  $S$  tardionrendszer, melyben  $+x_1$  a konjugált rendszer mozgásának iránya. Keletkezzen a kezdőpontban egy  $B$  tachion. Ez csupán a téridő  $x_1 = x_4^\infty \cong 0$  félegyenes által adott felébe indulhat ki. A részecske mozgása  $S$ -ben tökéletesen kauzális. Ezen nem változtat semmit az a tény se, hogy  $B$  mozoghat a kvázimúltba is. Ha viszont a keletkezés után  $B$  a  $-x_1 \equiv -x_4^\infty$  tengely irányában indulna el, a mozgása természetesen akauzális lenne. SZÁ szerint viszont ekkor a tardion esetében is lehetséges a múltba való mozgás. Amennyiben az ilyen kauzalitásvétést a tar-



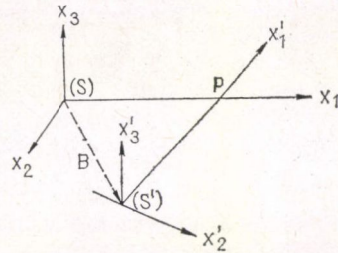
dionnál lehetetlennek tartjuk, SZÁ szerint a tachionnál se lehetséges a  $-x_1$  irányban való mozgás.

E szigorú feltétel ellenére nem minden esetben tökéletesen kauzális a tachionok mozgása. A 4. fejezet különböző eseteit vizsgálva kiderül, hogy a b) vagy c) „-ba” eseteinél lehetséges a kauzalitássértés. A c) esetet szemlélteti a 8. ábra. Az  $S$  megfigyelő szerint  $B$  a  $+x_1$  irányában a jövőbe repült ki. Az  $S'$  megfigyelő viszont már  $B$  érkezését az  $x'_1 \equiv x'_4$  felől írja le, ami azt jelenti, hogy  $B$  az  $S'$ -beni múltba tart. Míg tehát  $B$   $S$ -ben kauzálisan a jövőbe tart, addig  $S'$ -ben már akauzálisan a múltba.

Feinberg [1] és Pirani [2] gondolat kísérleteinek a lényege, hogy az  $S'$  megfigyelő egy  $C$  tachiont küld vissza  $S$  origójába abban a pillanatban, amint  $B$  érkezik. A Pirani-féle modifikációnál ez a visszaküldés közvetett, egy vagy több megfigyelőn keresztül történik, mely megfigyelők nincsenek az  $S$  és  $S'$  kezdőpontjait összekötő egyenesen. Egyes esetekben megtörténhet, hogy az  $S$  megfigyelő a visszaküldött részecskét hamarabb érzékeli, mint  $B$  keletkezését. Ez ellentmondásban van a kauzalitás elvével. Ezek a gondolat kísérletek az előbbi két esetben, legalábbis elvben, véghezvihetők.

A 4. fejezet a) ill. b) és c) „-ból” eseteinél semmiféle kauzalitássértés se jöhet szóba. Nem történhet meg, hogy egy tachion  $S$ -ben a jövőbe haladjon s közben egy másik  $S'$ -ben a múltba, mivel  $x_1$  és  $x'_1$  merőleges egy síkra (a) ill. egy hengerpalástra (b) vagy egy gömbfelületre (c), s közben  $x_1$  és  $x'_1$  „kifelé” orientált. Tachionok „odavisszaküldözgetése” semmiképp se lehetséges.

Az elmondottakból tehát az következik, hogy a konkrét esettől függ, összhangban vannak-e a tachionok a kauzalitás elvével.



8. ábra

## 6. A dinamikus paraméterek transzformációja a fényentűli sebességeknél

Legyen adva egy  $[D_i]$  számnégyes ( $i=1, 2, 3, 4$ ), miközben  $\sum_{i=1}^4 D_i^2 = D^2$  invariáns a Lorentz-transzformációval szemben.  $S \rightarrow S'$  átmenetkor  $D_i$  transzformációja

$$D'_i = \frac{\partial x'_i}{\partial x_j} D_j. \quad (6.1)$$

Ezt az összefüggést minden további nélkül érvényessé tehetjük a fénynél nagyobb sebességekre is, ha a parciális derivációkban a 4. fejezetben tárgyaltak alapján járunk el.

A (6.1)-es transzformációra konkrét példa maga a téridőbeni rádiuszvektor.  $D_i$  komponenseiről tehát ugyanaz elmondható, ami elmondható a téridőkoordinátákról. Nézzünk két példát:

I. A négyespotenciálnál  $[\vec{A}, i\varphi]$   $S^\infty$ -ben  $A_1$  lesz az elektrosztatikus potenciál, míg a másik három a vektorpotenciál összetevője. Ez azt jelenti, hogy pl. egy az  $S^\infty$ -ben nyugalomban levő töltött részecskénél csupán  $A_1 \neq 0$ , a többi három komponens zéró. Így a végtelen sebességű részecske a mozgásirányára ( $x_1$  tengely) merőleges



homogén mágneses teret gerjeszt, s közben az elektrosztatikus potenciál hiányzik!

II. A négyesimpulzusnál  $\left[\vec{p}, i \frac{E}{c}\right]$   $S^\infty$ -ben  $p_1$  lesz az energia ( $c$ -vel osztva)! Ez tachion esetében mindig pozitív, ahogy a tardionnál  $E > 0$ . Mivel a tardionnál  $p_1$  lehet negatív is, a tachionnál is lehet  $E < 0$  (mozgás a kvázimúltba). Ahogyan a tardionnál  $E \geq E_0 > 0$ , ugyanúgy a tachionnál

$$p_1 \geq p_\infty > 0. \quad (6.2)$$

Ez a feltétel másképp is megkapható. (3.13) szerint

$$c^2 \geq w_3^2 + w_2^2, \quad (6.3)$$

ahol  $w_2$  és  $w_3$  a tachion  $x_2$ -es és  $x_3$ -as sebességkomponense. Felhasználva (1)-et és (2)-t  $E \neq 0$  esetében (6.3) tovább alakítható:

$$\frac{w_2^2 + w_3^2}{c^2} = \frac{p_2^2 c^2 + p_3^2 c^2}{E^2} \leq 1 \quad (6.4)$$

ahonnan  $p^2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$  miatt

$$p_1^2 \geq p_\infty^2. \quad (6.5)$$

Ha  $E = 0$ ,  $p_2 = p_3 = 0$ , mert másképp (6.4) nem teljesülhetne. Ekkor  $p_1 = p_\infty$ . A (6.2) és a (6.3)-as feltételek tehát ekvivalensek.

A speciális relativitáselméletben gyakran használatos egy olyan másodfokú szimmetrikus tenzor  $F_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, 3, 4$ ), mely komponensei a Lorentz-transzformációnál az

$$F'_{ij} = \frac{\partial x'_i}{\partial x_n} \cdot \frac{\partial x'_j}{\partial x_m} \cdot F_{mn} \quad (6.6)$$

szerint változnak. Ennek a transzformációnak az általánosítása a fényentúli sebességekre kézenfekvő.

Látszólag ily módon a metrikus tenzor (a ritkán használt képzetes időkoordinátával felírt metrikus tenzor!) is transzformálható pl.  $S^\infty$ -be. Mindamellet az eddigi eszmefuttatásaink csupán a speciális relativitáselmélet keretében mozogtak, s ezért mindennemű gravitációs tér jelenlétét ki kell zárunk. Valószínű, hogy a gravitációs tér jelenlétében az egész konjugáció fogalma teljesen más tartalmat kap.

## 7. A kombinált kreáció

Az SZA-ból következik:

Minden  $E_0$  nyugalmi energiájú tardion-antitardionpárnak van egy tachion-antitachionpár megfelelője, melynél az impulzus végtelen sebességnél  $p_\infty c = E_0$ . A tardion és antitachion ill. az antitardion és tachion minden sajátossága egyforma. Ha az 1. ábrán az összes részecske-antirészecskepárt ábrázolnánk, a kép az  $E^2 = p^2 c^2$  félegyenes szerint szimmetrikus lenne. Az 1. ábra csak egyetlen tardion-antitardion-tachion-antitachion részecskenégyesre szemlélteti a szituációt.

Ismeretes, hogy egyetlen luxonból nem keletkezhet tardion-antitardionpár, mert ezt az energia- és az impulzusmegmaradás törvénye kizárja. SZA szerint ugyan-



ez lesz a helyzet a tachion-antitachionpárnál is. Felvetődik a kérdés, vajon az energia- és az impulzusemegmaradás törvénye megengedi-e, hogy egyetlen luxonból egy tardion-tachion (vagy tardion-antitachion, antitardion-tachion, antitardion-antitachion) kettős kreálódjék? Azt a folyamatot, amikor egy fényalatti és egy fényentúli részecske keletkezik, nevezzük el kombinált kreációnak.

Legyen adva egy  $S$  inerciarendszer, melyben  $+x_1$  a konjugált rendszer mozgásának az iránya. Mozogjon egy luxon úgy ( $E=pc$ ), hogy pályájának iránya a térben  $0 \leq \beta \leq \pi$  szöget zár be a  $-x_1$  tengellyel. Az origóban essen szét egy  $E_0$  nyugalmi energiájú tardionra és egy tachionra, melynek az impulzusa végtelen sebességnél  $p_{\infty}c = E_0$ . Az általánosság megsértése nélkül a luxon pályája merőleges az  $x_3$  tengelyre. A két keletkező részecske szintén mozogjon az  $x_3$ -ra merőlegesen. Természetesen nem lehet kizárni annak lehetőségét, hogy a két keletkező részecskének egyforma nagyságú nullától különböző és ellentétes irányú  $p_3$ -as impulzusa legyen. A végkövetkeztetést azonban nem befolyásolja, hogy ezeket speciálisan zérónak választjuk.

Érvényes:

$$\begin{aligned} E &= E_1 + E_2, \\ E \cos \beta &= (p_1 + p_2)c, \quad E_1^2 = p_1^2 c^2 + p_3^2 c^2 + E_0^2, \\ E \sin \beta &= (p_3 + p_4)c, \quad E_2^2 = p_2^2 c^2 + p_4^2 c^2 - E_0^2, \end{aligned} \quad (7.1)$$

ahol  $E_1$ ,  $p_1$  és  $p_3$  a tardion energiája és az  $x_1$  ill.  $x_2$  irányú impulzusa,  $E_2$ ,  $p_2$ ,  $p_4$  ugyanaz a tachionnál. Mindenekelőtt, ha  $E=0$ , akkor csak a fizikailag semmit se jelentő  $E_0=0$  esetében van megoldás. Ezért  $E \neq 0$ .

Öt egyenletünk van hat ismeretlenre, s ezért egyet közülük paraméterként kezelhetünk. Legyen ez  $p_2$ . Hogy a megoldás fizikailag helyes legyen

$$p_2 c \geq E_0. \quad (7.2)$$

Ha (7.1)-ből felírjuk az  $E_1^2 - E_2^2$ -et és felhasználjuk a további három összefüggést

$$E_2 = p_2 c \cos \beta + p_4 c \sin \beta - \frac{E_0^2}{E}. \quad (7.3)$$

Ezt négyzetre emelve és összehasonlítva  $E_2^2$  másik felírasmódjával

$$\begin{aligned} p_4^2 c^2 \cos^2 \beta + 2 \cdot p_4 c \sin \beta \left( \frac{E_0^2}{E} - p_2 c \cos \beta \right) + \frac{2 \cdot E_0^2}{E} p_2 c \cos \beta + \\ + p_2^2 c^2 \sin^2 \beta - E_0^2 \left( 1 + \left( \frac{E_0}{E} \right)^2 \right) = 0. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Legyen először  $\beta = \frac{\pi}{2}$ ,  $\cos \beta = 0$ ,  $\sin \beta = 1$ . Ekkor (7.4)-ből

$$\begin{aligned} p_4 c &= \frac{E}{2} + \frac{E_0}{2E} - \frac{p_2^2 c^2 E}{2E_0^2}, \quad p_3 c = \frac{E}{2} - \frac{E_0}{2E} + \frac{p_2^2 c^2 E}{2E_0^2} \\ - p_2 &= p_1, \\ E_1 &= \frac{E}{2} + \frac{E_0}{2E} + \frac{p_2^2 c^2 E}{2E_0^2}, \quad E_2 = \frac{E}{2} - \frac{E_0}{2E} - \frac{p_2^2 c^2 E}{2E_0^2}. \end{aligned} \quad (7.5)$$



Ha  $p_2 c \cong E_0$  és  $E > 0$ , akkor

$$E_1 \cong E + \frac{E_0^2}{2E} \cong E_0 \sqrt{2} > E_0 \quad (7.6)$$

vagyis bármilyen  $E > 0$ -ra van fizikailag reális megoldás. Ugyanis további feltétel, melynek teljesülni kell,  $E_1 \cong E_0$ .

Legyen  $\cos \beta \neq 0$ . Ekkor (7.4) diszkriminánsa

$$D^2 = E_0^2 \left( \frac{E_0^2}{E^2} + \cos^2 \beta - \frac{2p_2 c \cos \beta}{E} \right) \quad (7.7)$$

s ezért, ha  $\cos \beta > 0$ ,  $p_2 c$ -re felülről is korlátot kapunk

$$E_0 \cong p_2 c \cong \frac{E_0^2 + E^2 \cos^2 \beta}{2E \cos \beta}. \quad (7.8)$$

Ez az intervallum  $E > 0$ ,  $\cos \beta > 0$  esetében nem üres, mert  $(E \cos \beta - E_0)^2 \cong 0$ . Ha  $E > 0$ ,  $\cos \beta < 0$ , akkor  $D^2 > 0$ , s  $p_2$ -re csupán (7.2) érvényes. (7.4)-ből

$$\begin{aligned} p_4 c &= \frac{\left( p_2 c \cos \beta - \frac{E_0^2}{E} \right) \sin \beta \pm D}{\cos^2 \beta}, & E_1 &= E - E_2 \\ & & c p_1 &= E \cos \beta - c p_2 \\ E_2 &= \frac{p_2 c \cos \beta - \frac{E_0^2}{E} \pm D \sin \beta}{\cos^2 \beta}, & c p_3 &= E \sin \beta - c p_4. \end{aligned} \quad (7.9)$$

A nagyobbik  $E_1$ -re érvényes

$$E_1 \cong E + \frac{E_0^2}{E \cos^2 \beta} - \frac{p_2 c}{\cos \beta}. \quad (7.10)$$

Ha  $\cos \beta > 0$ , (7.8)-at felhasználva ( $p_2 c$  legnagyobb értékét behelyettesítve (7.10) jobb oldala minimális)

$$E_1 \cong \frac{E}{2} + \frac{E_0^2}{2E \cos^2 \beta} \quad (7.11)$$

melynek jobb oldala  $E > 0$  esetén nem kisebb, mint  $E_0$ , mert

$$\frac{(E - E_0)^2 \cos^2 \beta + E_0^2 \sin^2 \beta}{2E \cos^2 \beta} \cong 0. \quad (7.12)$$

Vagyis  $E_1 \cong E_0$ . Ha  $\cos \beta < 0$ , akkor (7.10) jobb oldala szintén nem kisebb  $E_0$ -nál. Ezt egyedül az utolsó tag is biztosítja, hiszen

$$-\frac{p_2 c}{\cos \beta} \cong E_0. \quad (7.13)$$

(7.9) megoldásai közül legalább az egyik mindig fizikailag helyes megoldás  $E > 0$  esetben. Ez azt jelenti, hogy bármilyen pozitív energiájú luxon, mozogjon bár



bármilyen irányban, az energia- és az impulzusmegmaradás törvénye értelmében szét-eshet egy tardion-tachion (vagy a másik háromféle) párra. Megjegyzendő, hogy természetesen  $E_2 < 0$  is lehet, hiszen ekkor a tachion a kvázimúlt irányában mozog.

A pontos megoldást illusztráljuk egy egyszerű példán. Az  $E = pc$  energiájú  $+x_1$  irányában mozgó részecske essen szét egy tardionra és egy tachionra, melyek szintén az  $x_1$  mentén mozognak. (7.1) helyett ekkor röviden írható

$$E = E_1 + E_2 = p_1 c + p_2 c, \quad (7.14)$$

$$E_0^2 = E_1^2 - p_1^2 c^2 = p_2^2 c^2 - E_2^2.$$

A felírás alakjából nyilvánvaló, hogy az egyenletnek akkor is van megoldása, ha

$$E_1 = p_2 c \equiv E_0 > 0, \quad E_2 = p_1 c. \quad (7.15)$$

Ezek után a megoldás egyszerű

$$E_1 = \frac{E^2 + E_0^2}{2E} \equiv E_0, \quad E_2 = \frac{E^2 - E_0^2}{2E}. \quad (7.16)$$

Valószínű, hogy a kombinált kreáció az előbbieket miatt nagyon könnyen végbe-megy. Mivel ez spontánul egy luxon szétesésével történik, s az ellenkező folyamat, a kombinált annihiláció (amikor egy tardion-tachion ütközésekor luxon keletkezik) csak két részecske ütközésekor játszódhat le, a kreáció minden bizonnyal sokkal gyakoribb, mint az annihiláció. S mivel pedig a kreációkor keletkező tardionok és tachionok sebességeiknél fogva gyorsan elkülönülnek egymástól, igen valószínű:

a) Luxonok a természetben valószínűleg sokkal ritkábbak, mint eddig gondoltuk. Lehet, hogy csupán a hipotetikus gravitonok vagy esetleg valamilyen más eddig nem ismert erős gravitációs terekkel kapcsolatban levő részecskék lehetnek luxonok. A speciális relativitáselméleti eszmefuttatásaink ugyanis csupán az erős gravitáció terek jelenlétében helytelenek.

b) A tardion-tachion szeparáció a természetben valószínűleg nagyon nagy, és ezért minden bizonnyal reménytelen a tachionok keresése ott, ahol a speciális relativitáselmélet nagy pontossággal használható.

Végül megjegyzendő, hogy az ütközéses kombinált kreációk (tehát amikor több luxon ütközik) vizsgálata az előbbiekhöz hasonló módon szintén lehetséges. Ezek jelentősége azonban az előbbiekkal összevetve kicsi, s ezért nem foglalkozunk velük részletesebben.

Szeretném megköszönni *Perjés Zoltánnak* és *Lukács Bélának* az egész témakört érintő megjegyzéseket.

#### IRODALOM

1. *Feinberg, G.*, Phys. Rev. 159, 1089, 1967.
2. *Pirani, F. A. E.*, Phys. Rev. D, Vol. 1, No. 12, 3224, 1970.
3. *Sudarshan, E. C. C.*, Arkiv för Fysik, 39, 585, 1969.
4. *Bilaniuk, O. M. P., Deshpande, V. K., Sundarshan, E. C. C.*: Am. J. Phys. 30, 718, 1962.







# A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

## A TÖLTÉSNELKÜLI TEREK KVANTUMELEKTRODINAMIKÁJA\*

P. JORDAN ÉS W. PAULI JR.

A Dirac-féle elmélet — amely az elektrodinamikai mezőmennyiségeket nem felcserélhető számoknak ( $q$ -számoknak) tekinti — továbbfejlesztéseként itt, legalábbis a töltött részecskék nélküli tiszta sugárzási mező speciális esetében, olyan felcserélési relációkat állítunk fel, amelyek alakja *relativisztikusan invariáns*. Megmutatjuk, hogy ezek az összefüggések Fourier-felbontás alkalmazása nélkül is megfogalmazhatók. Továbbá megadunk egy olyan általános matematikai módszert, amely lehetővé teszi, hogy a tér- és időkoordinátáktól folytonosan függő  $q$ -számok ( $q$ -függvények) közötti összefüggéseket úgy értelmezzük, mint olyan alkalmasan választott operátorok közötti összefüggéseket, melyek általánosított, a térmennyiségek egész menetétől függő  $\psi$  függvényekre (funkcionálokra) hatnak.

Ismeretes, hogy Diracnak\*\* sikerült először átvinni a kvantummechanikai módszereket az elektromágneses mező tárgyalására, oly módon, hogy a mező parciális hullámai amplitúdóit „ $q$ -számok”-nak fogta fel és ezekre állított fel felcserélési összefüggéseket. Ilyen úton biztosan lényeges előhaladásnak kellett megmutatkoznia, miután a skalár (egydimenziós) hullámegyenlet az előbbinél egyszerűbb feladatának tárgyalásából korábban kiderült,\*\*\* hogy a hullámmező Einstein által talált energia-ingadozásaira vonatkozó nehézség a mező sajátrezgéseinek kvantummechanikai tárgyalása révén megoldódott. Tényleg, Diracnak sikerült is a sugárzás emissziójára, abszorpciójára és diszperziójára egy következetes elméletet felállítani. Jordan\*\*\*\* pedig átvitte a hullámterek kvantálásának Dirac-féle módszerét az anyaghullámokra a Fermi-féle statisztikának megfelelően. Jordan és Klein egyik legújabb munkája\*\*\*\*\* alapján igen reményteljesnek tűnik, hogy sikerül megragadni a véges sebességgel terjedő részecskék kölcsönhatások kvantumelméletének még megoldatlan problémáját. Ilyen elméletnek az elektromágneses mező elektrosztatikus és sugárzási hatásait egységes módszerrel kell tárgyalnia.

A jelen munka tárgya azonban mégsem ez az általános kölcsönhatási probléma, hanem egyelőre csak — először a töltött részecskék nélküli tiszta sugárzás esetében — ki akarja küszöbölni az elméletnek a fentnevezett munkákban lefektetett megfogalmazásának olyan hiányosságát, amelyet a munkák szerzői is állandóan hangsúlyoz-

\* ZS. f. Phys. 47, 151, 1928.

\*\* P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. London (A) 114, 243, 710, 1927.

\*\*\* M. Born, W. Heisenberg és P. Jordan, ZS. f. Phys. 35, 557, 1926.

\*\*\*\* P. Jordan, Zs. f. Phys. 44, 473, 1927. Kiegészítés a korrektúránál: Vö. P. Jordan és E. Wigner, megjelenés alatt.

\*\*\*\*\* P. Jordan és O. Klein, ZS. f. Phys. 45, 751, 1927.



tak. E munkák ugyanis az időkoordinátát a térkoordinátákkal szemben állandóan sajátos módon kitüntetik, tehát az eredmények relativisztikusan nem invariánsak. Ezzel szemben a jelen munkában az elektromágneses mező kvantálásához használt módszerek *relativisztikusan invariánsak*.

Az 1. §-ban először úgy indulunk el, hogy az elektromágneses térerősségeket Fourier szerint polarizált, monokromatikus parciális hullámokra bontjuk, melyeknek amplitúdói, mint „ $q$ -számok” bizonyos felcserélési összefüggéseket elégítenek ki. Sikerül ezeket a relációkat úgy megfogalmazni, hogy a speciális relativitáselmélet egyetlen vonatkozási rendszerét sem tüntetik ki és eközben az elmélet a sugárzási energia ingadozási jelenségeit az említett korábbi eredmények szerint helyesen adja vissza. Ezt az álláspontot egy általánosabbal lehet felváltani,\* melyben a mező Fourier-felbontását nem használjuk explicite és magukat a térerősségeket  $q$ -számok kontinuumának és a téridő folytonos függvényeinek tekintjük. A  $q$ -számok ilyen sokaságát röviden „ $q$ -függvények”-nek nevezzük.

E munka első részének 2. §-ától a 4. §-ig ezt az általánosabb felfogást visszük keresztül állandóan szem előtt tartva a relativisztikus invarianciát. Itt meg kell jegyeznünk, hogy ezek a megfontolások teljesen átvihetők erőmentesen mozgó részecskék anyaghullámaira is, és ezen hullámok relativisztikusan invariáns kvantálásához vezetnek, ha az azonos részecskék Einstein—Bose statisztikának engedelmeskednek. Mivel Fermi-statisztikát követő részecskék esetében az anyaghullámok kvantálása nincs tökéletesen megoldva,\*\* most erre nem térünk ki részletesebben. Még hiányzik a hullámterek olyan általános, relativisztikusan invariáns kvantumelmélete, amely egyrészt a töltött részecskék jelenlétének megfelelő elektromágneses mezőket tárgyalja, másrészt az elektromágneses hullámok befolyását az anyaghullámokra számításba veszi. Ilyen elmélettől elvárjuk, hogy a szabad elektromágneses sugárzási mezőnek, úgyszintén az erőmentes részecskék anyaghullámainak itt felállított felcserélési relációit, mint speciális határeseteket, tartalmazzza.

Munkánk második része azzal a kérdéssel foglalkozik, hogy milyen módon értelmezhetők a  $q$ -függvények, mint bizonyos  $\psi$  „valószínűségi amplitúdókra” alkalmazott operátorok. A szokásos kvantumelméletben ugyanis, mint ismeretes, kiindulunk a

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi i} \quad \text{egyenletekből}$$

és a

$$H(p, q) = E$$

energiatételből, amelyek  $q$ -számok közti összefüggések, és áttérünk egy  $\psi_E(q)$  függvényre vonatkozó differenciálegyenletre; eközben  $p$ -t a  $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$  operátorral,  $q$ -t a  $q$ -val való szorzás operátorával helyettesítjük és  $H(p, q)$ -t mint operátort  $\psi$ -re alkalmazzuk:

$$H\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}, q\right) \psi_E(q) = E \psi_E(q).$$

\* Vö. P. Jordan Zs. f. Phys. 45, 766, 1927.

\*\* Megjegyzés a korrektúránál: lásd mégis Jordan és Wigner fent említett munkáját.



Harmonikus oszcillátor esetében, ahol

$$H(p, q) = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m}{2} (2\pi\nu_0)^2 q^2,$$

a megfelelő  $\psi$ -re vonatkozó differenciálegyenlet — amint *Schrödinger* megmutatta — az

$$E_n = (n + 1/2) h\nu_0$$

sajátértékekhez vezet, ahol  $n = 0, 1, 2, \dots$ . A  $\psi$  függvényeket az úgynevezett *Hermite*-féle polinomok adják meg;  $n=0$  esetén

$$\psi_0(q) = C \cdot e^{-\frac{2\pi^2 m\nu_0}{h} q^2}.$$

Ha, mint az üre sugárzás sajátrezgéseinek esetében *végtelen sok* oszcillátorról van szó (a végtelen sok szabadsági foknak megfelelően), akkor egy nehézség merül fel. Először is a teljes energia-sűrűség végtelen nagy lesz, mert ehhez (egy igen nagy üreg határesetében) a  $\nu$  és  $\nu + d\nu$  közé eső frekvenciájú sugárzás már  $n=0$ -nál is a

$$\frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{2} d\nu$$

értéket szolgáltatná. Másodszor meg, ha csak véges számú sajátrezgés gerjesztődik is, a végtelen sok sajátrezgés szorzata általában nem konvergál, s így az oszcillátorok végtelen sok  $q_L$  amplitúdói  $\psi$  függvényének egyelőre semmi határozott értéke nincsen.

Különböző megfontolások mellett szólnak, hogy a kristályrácsokban levő sajátrezgésekkel ellentétben (ahol elméleti és kísérleti okok egy zéruspont-energia létezését támasztják alá) a sugárzás sajátrezgéseinek a  $h\nu/2$  szabadsági fokonkénti „zéruspont-energiának” nincs fizikai realitása. Minthogy ugyanis most szigorúan harmonikus oszcillátorokkal van dolgunk és mivel ezt a „zéruspont-sugárzást” sem szórni, sem visszaverni nem lehet, úgy látszik, hogy beleértve energiáját vagy tömegét — minden kimutatási lehetőséget elkerül. Emiatt egyszerűbb és megnyugtatóbb az a felfogás, hogy az elektromágneses mezőnél ez a zéruspont-sugárzás egyáltalán nem létezik.

Ezzel kapcsolatban talán érdekes megjegyeznünk, hogy az előző felfogást lehetséges az egyes harmonikus oszcillátorokra matematikailag is megfogalmazni. Ugyanis, ha bevezetjük  $p$  és  $q$  helyett a következő mennyiségeket

$$P = \frac{1}{2\sqrt{\pi\nu_0 m}} p - i\sqrt{\pi\nu_0 m} q,$$

$$Q = \frac{1}{2\sqrt{\pi\nu_0 m}} p + i\sqrt{\pi\nu_0 m} q,$$

akkor a

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi i}$$

összefüggésből következik a

$$PQ - QP = i(pq - qp) = \frac{h}{2\pi}$$



reláció, továbbá

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m}{2} (2\pi v_0)^2 q^2 = \\ & = 2\pi v_0 \left( \frac{1}{2\sqrt{\pi v_0 m}} p + i \sqrt{\pi v_0 m} q \right) \left( \frac{1}{2\sqrt{\pi v_0 m}} p - i \sqrt{\pi v_0 m} q \right) + \pi v_0 i (pq - qp) = \\ & = 2\pi v_0 QP + \frac{h v_0}{2}. \end{aligned}$$

Ha tehát új Hamilton-függvényként bevezetjük:

$$H'(P, Q) \equiv 2\pi v_0 QP = E$$

és

$$PQ - QP = \frac{h}{2\pi},$$

akkor a sajátenergiákra adódik  $E_n = nhv_0$ , zéruspont-energia nélkül. Sőt megadhatók  $\psi_E(Q)$  sajátfüggvények is, amelyeknél a  $Q$  változó egy komplex mennyiség. Talán remélhető, hogy ezúton a zérusponti sugárzással összefüggő konvergencianehézségek a végtelen sok oszcillátor esetében majd legyőzhetők lesznek.

A jelen munka második részében módszert kellene megadni arra, hogy miként definiálhatók mezők  $\psi$  függvényei és ezekkel való műveletek úgy, hogy előre megadott,  $q$ -függvények közötti összefüggésekkel összhangban legyenek, anélkül, hogy a mezők explicit Fourier-felbontásához folyamodnánk. Sajnos, ilyen feltétel mellett nem sikerült az egyetlen oszcillátornál alkalmazott fenti vizsgálattal a nullaponti energiát megnyugtatóan kiküszöbölni. Ezért e munka második részének fejtegetései még nagy fokban javításra és kiegészítésre szorulnak, és inkább az ott alkalmazott általános matematikai módszerek, mint az ott megadott speciális összefüggések tekintetbevétele miatt kaptak helyet.

## I. $q$ -függvények és $q$ -számok módszerei

1. §. *Mezők Fourier-felbontása, relativisztikusan invariáns felcserélési relációk sajátrezgések amplitúdóira.* Képzeljük el az elektromágneses sugárzási mezőt, monokromatikus parciális sík hullámokra, mégpedig haladó hullámokra, szétbontva; ezek tehát semmi különleges határfeltételt nem elégítenek ki, amely valami átlátszatlan üregfalnak felelne meg. Célszerű viszont Fourier-integrál helyett egyelőre Fourier-sorokat használni. Legyen  $\vec{k}_s$  egy sík hullám összetevő terjedési vektora (iránya a hullámfelület normálisa, nagysága a hullámszám),  $|\vec{k}_s| = k_s$  az abszolút értéke,  $v_s$  a rezgésszám. Ekkor fennáll, hogy

$$k_s = \frac{v_s}{c}, \quad \vec{k}_s^2 = \frac{v_s^2}{c^2}. \quad (1)$$

Az  $s$  index a különböző sajátfrekvenciákat különbözteti meg. Először a mező Fourier-felbontásában fellépő  $\vec{k}_s$  terjedési vektorok olyan sűrűséggel legyenek a  $(k_x, k_y, k_z)$ -térben (röviden „ $\vec{k}$ -tér”) eloszolva, ami egy  $L$  élű ( $L^3$  térfogatú) kocka alakú üreg



sajátrezgéseinek felel meg. Ez azt jelenti, hogy feltételezzük, hogy a  $\vec{k}$ -tér egy cellájának közepes térfogata, amelyre a Fourier-sor egyetlen parciális hulláma esik (a később tárgyalandó polarizációs tényezőtől eltekintve):

$$\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = \frac{1}{L^3}. \quad (2)$$

Az  $\vec{E}$  és  $\vec{H}$  térerősségek monokromatikus hullámokból álló sajátrezgések  $\vec{E}_s$  és  $\vec{H}_s$  térerősségeiből tevődnek össze, azaz

$$\vec{E} = \sum \vec{E}_s, \quad \vec{H} = \sum \vec{H}_s.$$

Most még tekintetbe akarjuk venni, hogy minden  $\vec{k}_s$ -hez két független, lineárisan polarizált hullám tartozhat, melyek rezgésiránya  $\vec{k}_s$ -re merőleges. Hogy ezt képletben feltüntessük, minden  $s$ -hez bevezetünk egy  $(\xi, \eta, \zeta)_s$  derékszögű koordináta-rendszert, amelynek  $\zeta$  tengelye  $\vec{k}_s$ -sel párhuzamos és legyenek  $\vec{e}_\xi^{(s)}, \vec{e}_\eta^{(s)}, \vec{e}_\zeta^{(s)}$  a  $\xi, \eta, \zeta$  irányú egységvektorok. Egyik (az 1 indexű) lineárisan poláros sajátrezgés elektromos vektorának  $a_s^{(1)}$  amplitúdója legyen párhuzamos a  $\xi$  tengellyel, a másiké (a 2 indexű) az  $\eta$  ten-

gellyel. Ha ezen kívül azonnal látható okból a  $\sqrt{\frac{v_s}{L^3}}$  tényezőt kiemeljük, akkor felírhatjuk:

$$\left. \begin{aligned} E_s &= \sqrt{\frac{v_s}{L^3}} \{ (\vec{e}_\xi^{(s)} a_s^{(1)} + \vec{e}_\eta^{(s)} a_s^{(2)}) \cos 2\pi[(\vec{k}_s \vec{r}) - |\vec{k}_s| ct] + \\ &\quad + (\vec{e}_\xi^{(s)} b_s^{(1)} + \vec{e}_\eta^{(s)} b_s^{(2)}) \sin 2\pi[(\vec{k}_s \vec{r}) - |\vec{k}_s| ct] \}, \\ H_s &= [\vec{e}_\xi^{(s)} \vec{E}_s] = \sqrt{\frac{v_s}{L^3}} \{ (\vec{e}_\eta^{(s)} a_s^{(1)} - \vec{e}_\xi^{(s)} a_s^{(2)}) \cos 2\pi[(\vec{k}_s \vec{r}) - |\vec{k}_s| ct] + \\ &\quad + (\vec{e}_\eta^{(s)} b_s^{(1)} - \vec{e}_\xi^{(s)} b_s^{(2)}) \sin 2\pi[(\vec{k}_s \vec{r}) - |\vec{k}_s| ct] \}. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

A  $\sqrt{\frac{v_s}{L^3}}$  tényezőt úgy választottuk, hogy az egész üregergia,

$$E_s = \frac{1}{2} \int (\vec{E}_s^2 + \vec{H}_s^2) dV,$$

amennyiben ez egyetlen lineárisan poláros parciális hullámból származik,

$$E_s = \frac{1}{2} v_s (a_s^2 + b_s^2) \quad (4)$$

lesz, ahova  $a_s$  és  $b_s$  helyébe vagy  $a_s^{(1)}, b_s^{(1)}$  vagy  $a_s^{(2)}, b_s^{(2)}$  helyettesítendő. (A térerősségeket Heaviside-féle egységekben mértük.) Minthogy az  $E_s$  energia (eltekintve a zéruspont-energiától)  $h\nu_s$  többszöröse kell, hogy legyen, azaz szükséges, hogy

$$\frac{1}{2} (a_s^2 + b_s^2),$$

(egy additív állandó erejéig) az  $N=0, 1, 2, \dots$  sajátértékeket vegye fel, kézenfekvő feltevés az, hogy

$$a_s^{(1)} b_s^{(2)} - b_s^{(1)} a_s^{(2)} = a_s^{(2)} b_s^{(2)} - b_s^{(2)} a_s^{(2)} = i\hbar, \quad (I)$$



ahol természetesen  $a_s$  és  $b_{s'}$ , az  $s \neq s'$  esetén, éppúgy, mint különböző  $a_s$ -ek és különböző  $b_s$ -ek egymás között felcserélhetők. Szintén természetesnek látszik a különböző polarizációs irányokhoz tartozó amplitúdók felcserélhetőségét feltételezni:

$$\begin{aligned} a_s^{(1)} a_s^{(2)} - a_s^{(2)} a_s^{(1)} &= 0, & b_s^{(1)} b_s^{(2)} - b_s^{(2)} b_s^{(1)} &= 0, \\ a_s^{(1)} b_s^{(3)} - b_s^{(2)} a_s^{(1)} &= 0, & a_s^{(2)} b_s^{(1)} - b_s^{(1)} a_s^{(2)} &= 0. \end{aligned} \quad (I')$$

Könnyen belátható, hogy az (I) és (I') felcserélési relációk (rövidítés: „f.r.”) az  $\hat{e}_\eta^{(s)}$ ,  $\hat{e}_\eta^{(s)}$  egységvektorok megválasztásától függetlenek, ha ezek egymásra és  $\vec{k}_s$ -ra merőlegesen állanak. Hasonlóképpen meg lehet mutatni (I) és (I') invarianciáját koordináta-rendszer zérus-pontjának megváltoztatásával szemben, amely a mező (3) Fourier-felbontásánál először ki volt tüntetve. Ennek a zérus-pontnak megváltoztatásával ugyanis az  $a_s$  és  $b_s$ -ek lineárisan és ortogonálisan transzformálódnak minden egyes polarizációs irány esetében:

$$a'_s = a_s \cos \delta_s + b_s \sin \delta_s,$$

$$b'_s = -a_s \sin \delta_s + b_s \cos \delta_s$$

és ezért tényleg

$$a'_s b'_s - b'_s a'_s = a_s b_s - b_s a_s. \quad (5)$$

Ha továbbá figyelembe vesszük, hogy nem  $\vec{k}_s$  pontos értékei, hanem csak (2) sűrűségük számít, akkor (1)-re való tekintettel könnyű belátni, hogy az (I) f.r.-ek eleget tesznek a *relativisztikus invariancia* követelményének.

Ez különösen világos lesz, ha végrehajtjuk a *határátmenetet* a *Fourier-sorról* a *Fourier-integrálra*. Ekkor minden polarizációs irányra — egyszerűség kedvéért az (1) vagy (2) indexet elhagyjuk —

$$\sum_s a_s^2 \frac{1}{L^3} = \sum_s a_s^2 \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z \rightarrow \int A^2(k_x, k_y, k_z) dk_x dk_y dk_z$$

és hasonló átmenet érvényes  $\sum_s b_s^2 \frac{1}{L^3}$ -re. Továbbá, az  $E(k_x, k_y, k_z) = E(\vec{k})$

$$\sum_s E_s \frac{1}{L^3} = \sum_s \frac{1}{L^3} \cdot \frac{1}{2} \int (\vec{E}_s^2 + \vec{H}_s^2) dV \rightarrow \int E(\vec{k}) dk_x dk_y dk_z$$

definícióját felhasználva, adódik

$$E(\vec{k}) = \frac{1}{2} v(\vec{k}) [A^2(\vec{k}) + B^2(\vec{k})]. \quad (6)$$

Ha összegezzük egyrészt minden sajátrezgésre, melyre  $\vec{k}_s$  a  $\vec{k}$ -tér bizonyos  $\Omega_1(\vec{k})$  tartományába és másrészt minden olyanra, melyre  $\vec{k}_s$  egy másik  $\Omega_2(\vec{k})$  tartományba esik, továbbá  $\Omega_{12}$ -vel jelöljük az  $\Omega_1$  és  $\Omega_2$  közös tartományát a  $\vec{k}$ -térben, akkor kapjuk:

$$\frac{1}{ih} \frac{1}{L^3} \left( \sum_{\vec{k}_s \in \Omega_1(\vec{k})\text{-ban}} a_s \sum_{\vec{k}_s \in \Omega_2(\vec{k})\text{-ban}} b_s - \sum_{\vec{k}_s \in \Omega_2(\vec{k})\text{-ban}} b_s \sum_{\vec{k}_s \in \Omega_1(\vec{k})\text{-ban}} a_s \right) = \Omega_{12}(\vec{k}).$$



Ugyanis a bal oldal értéke mindkét összeg közös sajátrezgése  $L^3$ -nel osztott számának adódik, ami pedig (2) szerint  $\Omega_{12}(\vec{k})$ -val egyezik meg. Másfelől a bal oldalon fellépő összegek határátmenetben egyenlőkké válnak az  $A(\vec{k})$ -val és  $B(\vec{k})$ -val képezett megfelelő integrálokkal úgy, hogy írhatjuk

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_1} A(\vec{k}) dk_x dk_y dk_z \int_{\Omega_2} B(\vec{k}) dk_x dk_y dk_z - \\ & - \int_{\Omega_2} B(\vec{k}) dk_x dk_y dk_z \int_{\Omega_1} A(\vec{k}) dk_x dk_y dk_z = i\hbar \Omega_{12}, \end{aligned} \quad (7)$$

vagy a következő paragrafusban közelebbről megvizsgált Dirac-féle  $\delta$ -függvény segítségével

$$A(\vec{k})B(\vec{k}') - B(\vec{k}')A(\vec{k}) = i\hbar\delta(\vec{k} - \vec{k}'). \quad (8)$$

A Fourier-sorról a Fourier-integrálra való határátmenetnél fontosabb az, hogy teljesen elhagyjuk a mező Fourier-felbontását és mint  $q$ -szám kontinuumot („ $q$ -függvény”) fogjuk fel. Ehhez szükséges egy új, relativisztikusan invariáns  $\delta$ -függvényt definiálni, ami a következő paragrafusban történik meg.

2. §. *A relativisztikusan invariáns  $\Delta$ -függvény definíciója és jelentése.* Az egyetlen  $x$  változó  $\delta$ -függvényét az

$$\int_a^b \delta(x) dx = \begin{cases} 1, & \text{ha } (a, b) \text{ a zérus-pontot tartalmazza,} \\ 0 & \text{egyébként,} \end{cases} \quad (9)$$

egyenlet definiálja. Ekkor fennáll az is, hogy

$$\int_a^b f(x) \delta(x) dx = \begin{cases} f(0), & \text{ha } (a, b) \text{ a zérus-pontot tartalmazza,} \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases} \quad (10)$$

A  $\delta(x)$  „függvény” felfogható egy  $\delta_1(x), \delta_2(x), \dots, \delta_N(x) \dots$  függvényt sorozat rövidítése gyanánt, amelyre a  $\lim_{N \rightarrow \infty} \int_a^b \delta_N(x) dx$  létezik és az előbb megadott értékkel bír.

Éppen így jelenti az

$$\int_a^b f(x) \delta(x) dx \quad \text{a} \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \int_a^b f(x) \delta_N(x) dx$$

határértéket. Ilyen függvényt sorozatként használható pl.

$$\delta_N(x) = \frac{\sin 2\pi Nx}{\pi x} = 2 \int_0^N \cos 2\pi kx dk, \quad (11)$$

ugyanis ekkor

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_a^b f(x) \delta_N(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{y}{2\pi N}\right) \frac{\sin y}{\pi y} dy = \begin{cases} f(0), & \text{ha } a < 0, \quad b > 0, \\ 0, & \text{ha } a > 0, \quad b > 0. \end{cases}$$

Természetesen (11) nem az egyetlen lehetséges  $\delta_N(x)$  sorozat, amely (10)-et  $\lim_{N \rightarrow \infty}$ -ben kielégíti.



A következő paragrafusokban találkozunk egy bizonyos  $\Delta_N(x, y, z, t)$  függvény-sorozattal, amelyet a következő meghatározás ad meg:

$$\Delta_N(x, y, z, ct) = \iiint_{\substack{\text{Gömb} \\ |k| < N}} \frac{2}{|\vec{k}|} \sin 2\pi(k_x x + k_y y + k_z z - |\vec{k}| ct) dk_x dk_y dk_z \quad (12)$$

$$(|k| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}).$$

Lényeges itt  $t$  együtthatójának összekapcsolása  $x, y, z$  együtthatóival, ami azt jelenti, hogy mindazon parciális hullámok, amelyekből (12) összetevődik,  $c$  sebességgel terjednek.  $\Delta_N(x, y, z, t)$  egyébként rögzített origó mellett relativisztikusan invariáns, mert — amint könnyen utánaszámolhatunk — abban az esetben, ha

$$k_x, k_y, k_z, i|k|$$

egy nulla hosszúságú négyes vektor komponensei, akkor

$$\frac{1}{|k|} dk_x dk_y dk_z$$

invariáns Lorentz-transzformációkkal szemben.

A  $\Delta_N(\dots)$  sorozatot mint  $\Delta$ -függvényt fogjuk értelmezni, vagyis a

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_{V_4} f(x, y, z, t) \Delta_N(x \dots t) dV_4$$

határértéket tekintjük, amelyben egy tetszőleges négydimenziós négyes tartományra integrálunk és

$$dV_4 = dx dy dz c dt.$$

Ezt a határértéket ismét jelképesen fogjuk felírni:

$$\int f(x, y, z, t) \Delta(x, y, z, t) dV_4$$

és az olyan  $\Delta_N$  sorozatokat, amelyekre minden  $f$  esetén ez a határérték megegyezik, nem lényegesen különbözőknek fogjuk tartani, függetlenül attól, vajjon  $\Delta_N$  éppen (12) alakú-e vagy sem.

Semmi nehézséget nem okoz, hogy  $\Delta_N$  ilyen speciális alakja esetén a kérdéses határértéket kiszámítsuk. Legelőször a (12) integrált határozzuk meg. Polárkoordináták bevezetése a  $k$  térben, a  $\angle(\vec{r}, \vec{k}) = \vartheta$  és  $\cos \vartheta = u$  jelöléssel,

$$dk_x dk_y dk_z = 2\pi |k|^2 d|k| du$$

adja, hogy

$$\Delta_N(x \dots t) = 4\pi \int_0^N |k| d|k| \int_{-1}^{+1} \sin 2\pi |k| (ru - ct) du, \quad (r = +\sqrt{x^2 + y^2 + z^2})$$

$$= 2 \int_0^N d|k| \frac{1}{r} [\cos 2\pi |k| (r + ct) - \cos 2\pi |k| (r - ct)]$$

vagyis végül

$$\Delta_N(x \dots t) = \frac{1}{\pi r} \left[ \frac{\sin 2\pi N(r + ct)}{r + ct} - \frac{\sin 2\pi N(r - ct)}{r - ct} \right]. \quad (12')$$

(Vegyük figyelembe, hogy a zárójelben levő negatív előjel következtében a  $t \neq 0$ ,  $r=0$  esetben véges marad!)

Az e paragrafus elején szerepelt  $\delta_N(x)$  függvény tulajdonságaival tökéletes analógiában most a  $\lim_{N \rightarrow \infty} f(\dots) \Delta_N dV_4$ -et is megadhatjuk. Ha  $V_4$  az integrációs tartomány, és  $V_3^+$  ennek háromdimenziós metszete az  $r+ct=0$  és  $V_3^-$  az  $r-ct=0$  „fénykúppal”, akkor

$$\int_{V_4} f(x \dots t) \Delta(x \dots t) dV_4 = \int_{V_3^+} f(x, y, z, ct = -r) \frac{1}{r} dx dy dz - \int_{V_3^-} f(x, y, z, ct = r) \frac{1}{r} dx dy dz. \quad (\text{II})$$

Ezt az egyenletet tekintjük a relativisztikusan invariáns-függvény definíciójának (vegyük figyelembe  $\frac{dx dy dz}{r}$  invarianciáját), a (12) sorozat által adott speciális megvalósítástól függetlenül. Ha (II)-be  $f=1$ -et helyettesítünk, akkor megkapjuk  $\int_{V_4} \Delta dV_4$  értékét:

$$\int_{V_4} \Delta dV_4 = \int_{V_3^+} \frac{dx dy dz}{r} - \int_{V_3^-} \frac{dx dy dz}{r}. \quad (\text{II}')$$

(12) alapján szemléletesen ezt mondhatjuk: Az itt bevezetett  $\Delta$ -függvény egy térbelileg izotrop, határátmenetben végtelenül vékony  $r=ct$  sugarú héjra összesűrített gömbhullám, amely először fénysebességgel összehúzódik,  $t=0$ -nál az  $r=0$  pontba összezugorodik, majd ismét fénysebességgel kitágul. Egyébként

$$\Delta(-x, -y, -z, -t) = -\Delta(x, y, z, t). \quad (13)$$

Meg kell még jegyezni, hogy a -függvény deriváltjait a következő határérték definiálja:

$$\begin{aligned} \int_{V_4} f \frac{\partial \Delta}{\partial x_i} dV_4 &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{V_4} f \frac{\partial \Delta_N}{\partial x_i} dV_4 = \lim_{N \rightarrow \infty} - \int \frac{\partial f}{\partial x_i} \Delta_N dV_4 = \\ &= \int_{V_3^+} \left( -\frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \frac{dx dy dz}{r} - \int_{V_3^-} \left( -\frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \frac{dx dy dz}{r}, \end{aligned}$$

ahol feltesszük, hogy  $f$  az integrációs tartomány határán eltűnik. Hasonlóképpen kell a magasabbrendű parciális deriváltakat definiálni. Meg kell jegyeznünk még, hogy e definíció értelmében

$$\sum_{a=1}^4 \frac{\partial^2 \Delta}{\partial x_a^2} \equiv 0. \quad (14)$$

3. §. Felcserélési relációk a  $q$ -függvényeknek tekintett elektromágneses térerősségekre a Fourier-felbontás mellőzésével. Most megkíséreljük felírni két tetszőleges, különböző téridőpontban vett elektromágneses térerősségkomponens kommutátorát a relativisztikus invariancia megtartásával, anélkül, hogy a végeredményben a mező



Fourier-felbontását kifejezetten alkalmaznánk. Tehát a következő kifejezések meghatározásáról van szó:

$$\vec{E}_0(P)\vec{E}_k(P') - \vec{E}_k(P')\vec{E}_i(P), \quad \vec{H}_i(P)\vec{H}_k(P') - \vec{H}_k(P')\vec{H}_i(P) \\ \vec{E}_i(P)\vec{H}_k(P') - \vec{H}_k(P')\vec{E}_i(P),$$

ahol  $P$  és  $P'$  rövidítések  $P$ -nek  $x, y, z, t$  és  $P'$ -nek  $x', y', z', t'$  négy koordinátáját, és ahol az  $i, k=1, 2, 3$  index az  $x, y, z$  irányú komponenseket jelzik. A megadott kifejezésekre a szögletes zárójeles szimbólumokat is használjuk:

$$[\vec{E}_i(P), \vec{E}_k(P')], \quad [\vec{H}_i(P)\vec{H}_k(P')], \quad [\vec{E}_i(P)H_k(P')].$$

Számításainknál a térerősségekre vonatkozó (3) kifejezésből indulunk ki:

$$\vec{E}_s = \sqrt{\frac{v_s}{L^3}} \{ (\vec{e}_\xi a_s^{(1)} + \vec{e}_\eta a_s^{(2)}) \cos 2\pi [(\vec{k}_s \vec{r}) - |k_s| ct] + \\ + (\vec{e}_\xi b_s^{(1)} + \vec{e}_\eta b_s^{(2)}) \sin 2\pi [(\vec{k}_s \vec{r}) - |k_s| ct] \}, \\ \vec{H}_s = \sqrt{\frac{v_s}{L^3}} \{ (\vec{e}_\eta a_s^{(1)} - \vec{e}_\xi a_s^{(2)}) \cos 2\pi [(\vec{k}_s \vec{r}) - |k_s| ct] + \\ + (\vec{e}_\eta b_s^{(1)} - \vec{e}_\xi b_s^{(2)}) \sin 2\pi [(\vec{k}_s \vec{r}) - |k_s| ct] \}.$$

Itt  $a_s^{(1)}, b_s^{(1)}$  és  $a_s^{(2)}, b_s^{(2)}$ -re az (I) egyenletek érvényesek, míg  $a_s^{(1)} b_s^{(2)}$ -vel,  $a_s^{(2)} b_s^{(1)}$ -vel a (I') szerint felcserélhetők.

Felhasználjuk az

$$(\vec{e}_\xi)_i (\vec{e}_\xi)_k + (\vec{e}_\eta)_i (\vec{e}_\eta)_k = \delta_{ik} - (\vec{e}_\xi)_i (\vec{e}_\xi)_k \\ (i, k = x, y, z; \delta_{ik} = 0, \text{ ha } i \neq k, 1, \text{ ha } i = k)$$

$$(\vec{e}_\xi)_i (\vec{e}_\eta)_k - (\vec{e}_\eta)_k (\vec{e}_\xi)_i = (\vec{e}_\xi)_l = \frac{(\vec{k}_s)_l}{|k_s|}$$

( $i, k, l$  az 1, 2, 3 páros permutációja)

összefüggéseket, ahol egyébként tekintetbe vettük, hogy a tengely a  $k$ -val párhuzamos. Ha tehát az indexek megadott értelmezésével

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{ik} &= \alpha_{ki} = |\vec{k}_s|^2 \delta_{ik} - (\vec{k})_i (\vec{k})_k, \\ \beta_{ik} &= -\beta_{ki} = |\vec{k}_s| \cdot (\vec{k}_s)_l \quad (\beta_{ik} = 0, \text{ ha } i = k) \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

továbbá

$$(P_s) = 2\pi [(\vec{k}_s \vec{r}) - |\vec{k}_s| ct], \quad (P'_s) = 2\pi [(\vec{k}'_s)^* - |\vec{k}_s| ct']$$

\* Hibás; helyesen  $(\vec{k}_s \vec{r})$ . Fordító

(I)-nek megfelelően kapjuk

$$[\vec{E}_i(P), \vec{E}_k(P')] = [\vec{H}_i(P), \vec{H}_k(P')] = i\hbar c \frac{1}{L^3} \sum_s |\vec{k}_s| \alpha_{ik}^{(s)} [\cos(P_s) \sin(P'_s)] - \\ - \sin(P_s) \cos(P'_s) = i\hbar c \frac{1}{L^3} \sum_s |\vec{k}_s| \alpha_{ik}^{(s)} \sin(P'_s - P_s),$$

éppígy:

$$[\vec{E}_i(P), \vec{H}_k(P)] = -[\vec{H}_i(P), \vec{E}_k(P')] = i\hbar c \frac{1}{L^3} \sum_s \frac{2}{|\vec{k}_s|} \beta_{ik}^{(s)} \sin(P'_s - P_s)$$

(tehát speciálisan  $\vec{E}_1(P) \vec{H}_1(P')$ -vel felcserélhető).

Most (2) szerint az  $\frac{1}{L^3} \sum_s (\dots)$  összeget helyettesítjük az  $\int (\dots) dk_x dk_y dk_z$  integrállal, de először a  $\vec{k}$ -térben  $N$  sugarú gömbre integrálunk és azután térünk át az  $N \rightarrow \infty$  limeszre. Továbbá felhasználjuk, hogy  $\sin(P'_s - P_s)$ -nek a  $P$  vagy  $P'$  pont  $x_i$  és  $x_k$  térkoordinátái szerinti második deriváltja képzésénél a  $-4\pi^2 k_i k_k$  tényező, az  $x_l$  és  $ct$  szerinti derivált képzésénél a  $+4\pi^2 |\vec{k}_s| k_l$  tényező lép a  $\sin(\dots)$  elé. Így az  $\alpha_{ik}^{(s)}$  és  $\beta_{ik}^{(s)}$  tényezők ilyen második deriváltak alkalmas kombinációival helyettesíthetők és kapjuk

$$[\vec{E}_i(P), \vec{E}_k(P')] = [\vec{H}_i(P), \vec{H}_k(P')] = \\ = \frac{i\hbar c}{8\pi^2} \iiint \frac{2}{|\vec{k}|} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} - \delta_{ik} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \sin(P' - P)_k dk_x dk_y dk_z, \\ [\vec{E}_i(P), \vec{H}_k(P')] = -[\vec{H}_i(P), \vec{E}_k(P')] = \\ = \frac{i\hbar c}{8\pi^2} \iiint \frac{2}{|\vec{k}|} \frac{\partial^2}{c \partial t \partial x_l} \sin(P' - P)_k dk_x dk_y dk_z.$$

Itt a differenciálás és integrálás felcserélhető és a differenciálás előtt elvégzett integrálás megadja éppen a (12)-ben szereplő  $\Delta_N$  függvényt, amelybe  $x' - x, \dots, t' - t$  argumentumokat kell helyettesíteni. Ha  $\Delta(x' - x, \dots, t' - t) - t \Delta(P' - P)$ -vel jelöljük és elvégezzük az  $N \rightarrow \infty$  határátmenetet, akkor végülis kapjuk, hogy

$$\left. \begin{aligned} [\vec{E}_i(P), \vec{E}_k(P')] &= [\vec{H}_i(P), \vec{H}_k(P')] = \frac{i\hbar c}{8\pi^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} - \delta_{ik} \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} \right) \Delta(P' - P), \\ [\vec{E}_i(P), \vec{H}_k(P')] &= -[\vec{H}_i(P), \vec{E}_k(P')] = \frac{i\hbar c}{8\pi^2} \frac{\partial^2}{c \partial t \partial x_l} \Delta(P' - P) \end{aligned} \right\} \quad (\text{III})$$

( $i, k = 1, 2, 3$ ;  $i = k$  esetén a második egyenlet jobb oldala zérus,  $i \neq k$  esetén  $i, k, l$  az 1, 2, 3 páros permutációja).

Emlékezzünk arra, hogy (13) szerint:

$$\Delta(P - P') = -\Delta(P' - P). \quad (13')$$

Felhasználva az

$$(F_{41}, F_{42}, F_{43}) = i\vec{E}, \quad (F_{23}, F_{31}, F_{12}) = \vec{H}$$

$$(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x, y, z, ict)$$



jelöléseket, (III)-at egyetlen invariáns alakban foglalhatjuk össze:

$$[F_{ik}(P), F_{lm}(P')] = \frac{i\hbar c}{8\pi^2} \Delta_{ik,lm}(P' - P), \quad (\text{III}')$$

ahol a  $\Delta_{ik,lm}$  rövidítés jelentése:

$$\Delta_{ik,lm} = \left( \delta_{kl} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_m} - \delta_{il} \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_m} + \delta_{im} \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_l} - \delta_{km} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_l} \right) \Delta \quad (16)$$

(III) és (III') összevetésénél fel kell használnunk az előző paragrafus (14) egyenletét, azaz

$$\sum_a \frac{\partial^2}{\partial x_a^2} \Delta = 0.$$

4. §. *A térerősségek f.r.-inak egyszerű következményei. A kvantumelektrodinamika viszonya a Maxwell-féle egyenletekhez.* Azok a  $q$ -függvények, amelyek a kvantumelektrodinamika itt lefektetett alakjában a térerősségeket írják le, a térnek és időnek nem tetszőlegesen függvényei, hanem olyanok, amelyek a Maxwell-féle

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial F_{ik}}{\partial x_j} + \frac{\partial F_{kj}}{\partial x_i} + \frac{\partial F_{ji}}{\partial x_k} &= 0 \\ \sum_a \frac{\partial F_{ia}}{\partial x_a} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{IV})$$

vákuum-egyenleteket kielégítik. Ezt már a kiindulásunk, a mező fénysebességgel terjedő parciális hullámok szerinti kifejtése tartalmazza. Emellett a töltés- és áram-sűrűségeket mindenütt eltűnőnek vettük fel.

Ennek az a feltevés volt az alapja, hogy e speciális esetnek vizsgálata a kvantumelektrodinamika törvényeivel összeegyeztethető absztrakció. Hogy ez mennyiben helytálló, az egy általánosabb, a töltött részecskéket tekintetbe vevő kvantumelektrodinamika felállításán keresztül lesz megítélhető. Ha azonban ezt a feltevést megengedjük, akkor mondhatjuk, hogy a (IV) klasszikus téregyenletek a kvantumelektrodinamikába is kifejezetten bevonulnak, és pedig, mint *mellékfeltételek, amelyeket a térerősségek  $q$ -függvényeire kirovunk.*

Hogy a (III) f.r.-k a (IV) mező-egyenletekkel összeegyeztethetők legyenek, a (IV) egyenletek bal oldalainak (III) következtében valamennyi  $F_{lm}$  térerősségkomponenssel felcserélhetőeknek kell lenniük. Hogy tényleg ez az eset áll fenn, azért szavatol már a (III') f.r.-k levezetése a mező Fourier-felbontásának f.r.-iből. Könnyen meggyőződhetünk erről közvetlen számítással. A (IV) második egyenletét illetően különlegesen egyszerű a megfontolás, mert a  $\sum_k \frac{\partial}{\partial x_k}$  művelet alkalmazása a (III') jobb oldalára tetszőlegesen rögzített 1,  $m$  mellett adja, hogy:

$$\left( -\delta_{il} \frac{\partial}{\partial x_m} + \delta_{im} \frac{\partial}{\partial x_l} \right) \sum_a \frac{\partial^2 \Delta}{\partial x_a^2}$$



és ez (14) következtében azonosan nulla. Hasonlóképpen, csupán valamivel hosszadalmasabban megy a (IV) első egyenletére vonatkozó számítás. Gyorsabban célhoz érünk, ha  $F_{ik}$ -hoz bevezetjük az  $F_{ik}^*$  duális tenzort, amelynek komponenseit

$$(F_{23}^*, F_{31}^*, F_{12}^*) = -i\vec{E}, \quad (F_{41}^*, F_{42}^*, F_{43}^*) = -\vec{H}$$

adja meg; ennek segítségével (IV) első egyenlete ismert módon így írható:

$$\sum_{\alpha} \frac{\partial F_{i\alpha}^*}{\partial x_{\alpha}} = 0. \quad (\text{IV}')$$

Az átmenet a duális tenzorra azt jelenti, hogy  $i\vec{E}$ -t  $-\vec{H}$ -val, azaz  $\vec{E}$ -t  $i\vec{H}$ -val és  $\vec{H}$ -t  $-i\vec{E}$ -vel helyettesítjük. Ahogy (III)-ból közvetlenül látható, minden zárójeles kifejezés értéke ekkor egyszerűen előjelet vált. Tehát szintén fennáll

$$[F_{ik}^*(P), F_{lm}^*(P')] = -[F_{ik}(P), F_{lm}(P')] = -\frac{ihc}{8\pi^2} \Delta_{ik,lm}(P' - P), \quad (\text{III}'')$$

amiből (IV') felcserélhetősége  $F_{lm}$ -mel éppúgy következik, mint ahogy  $\sum_{\alpha} \frac{\partial F_{i\alpha}^*}{\partial x_{\alpha}}$  felcserélhetősége  $F_{lm}^*$ -mel (III')-ből.

Míthogy továbbá (III) alapján könnyen igazolható, hogy

$$[F_{ik}(P), F_{lm}^*(P')] = -[F_{ik}^*(P), F_{lm}(P')], \quad [F_{ik}(P), F_{ik}^*(P')] = 0, \quad (17)$$

(III'')-vel összevetve következik az

$$E_{ik} = F_{ik} + F_{ik}^*, \quad E_{ik}^* = F_{ik} - F_{ik}^* \quad (18a)$$

tenzorokra

$$[E_{ik}(P), E_{lm}(P')] = 0, \quad [E_{ik}^*(P), E_{lm}^*(P')] = 0, \quad (18b)$$

$$[E_{ik}(P), E_{lm}^*(P')] = 2[F_{ik}(P), F_{lm}(P')] + 2[F_{ik}^*(P), F_{lm}(P')],$$

$$[E_{ik}^*(P), E_{lm}(P')] = 2[F_{ik}(P), F_{lm}(P')] - 2[F_{ik}^*(P), F_{lm}(P')].$$

A (18b) összefüggések azért különösen figyelemreméltóak, mert ezek azt jelentik, hogy speciális alkalmazásoknál szabad csak az  $E_{ik}(P)$   $q$ -függvényeket — vagy csak az  $E_{ik}^*(P)$  függvényeket — közös névű függvényekkel („ $c$ -függvényekkel”) helyettesíteni, mivel értékeik különböző téridőpontokban mindig felcserélhetők. Hasonló tulajdonságú függvényeket kapunk akkor is, ha az  $F_{ik}(P)$  térerősségeket tetszőlegesen választandó zérus pontra tükrözzük:

$$F_{ik}^+(P) = \frac{1}{2} [F_{ik}(P) + F_{ik}(-P)], \quad F_{ik}^-(P) = \frac{1}{2} [F_{ik}(P) - F_{ik}(-P)]$$

úgy, hogy fennáll

$$F_{ik}^+(P) = F_{ik}^+(-P); \quad F_{ik}^-(P) = -F_{ik}^-(-P).$$

Könnyen megkapjuk, hogy

$$\begin{aligned} [F_{ik}^+(P), F_{lm}^+(P')] &= \frac{ihc}{8\pi^2} \cdot \frac{1}{4} \Delta_{iklm}(P' - P) + \Delta_{iklm}(P' + P) + \\ &+ \Delta_{iklm}(-P' - P) + \Delta_{iklm}(-P' + P)]. \end{aligned}$$



Mivel  $\Delta_{iklm}$ -re fennáll a (13')-höz hasonló

$$\Delta_{iklm}(P' - P) = -\Delta_{iklm}(-P' + P),$$

$$\Delta_{iklm}(P' + P) = -\Delta_{iklm}(-P' - P)$$

szimmetriatulajdonság, a zárójel két középső és az első és utolsó tagja egymást kiejtik és a jobb oldal eltűnik. Hasonlót találunk a  $[F_{ik}^-(P), F_{lm}^-(P')]$ -ra is úgy, hogy fennáll

$$[F_{ik}^+(P), F_{lm}^+(P')] = [F_{ik}^-(P), F_{lm}^-(P')] = 0. \quad (19a)$$

Viszont ugyanilyen módon azonnal következik, hogy

$$[F_{ik}^+(P), F_{lm}^-(P')] = \frac{ihc}{16\pi^2} [\Delta_{ik,lm}(P' - P) + \Delta_{ik,lm}(P' + P)], \quad (19b)$$

$$[F_{ik}^-(P), F_{lm}^+(P')] = \frac{ihc}{16\pi^2} [\Delta_{ik,lm}(P' - P) - \Delta_{ik,lm}(P' + P)]. \quad (19c)$$

Azt, hogy a Maxwell-egyenletek bal oldalai az összes térkomponensekkel felcserélhetők, az utóbbi egyenletekre alkalmazva a következőképpen is megfogalmazhatjuk. Rögzített  $l, m$  és  $P'$  mellett a (19b) jobb oldalai  $F_{ik}^+(P)$ -nek véve, a (IV) Maxwell-egyenletek megoldásai. Ugyanez áll fenn akkor is, ha (19b) jobb oldalát rögzített  $i, k$  és  $P$  mellett  $F_{lm}^-(P')$  helyére tesszük be. Szabatosabb a  $\Delta$ -függvény használatára miatt a Maxwell-egyenletek megoldásai helyett mindig ilyen megoldások szinguláris határeseiteiről beszélni.

A (19) összefüggések utóbbi tulajdonságát később felhasználjuk. Itt még megjegyezzük, hogy a négyespotenciálokra nem áll fenn semmilyen egyszerűen megfogalmazható relativisztikusan invariáns f.r., melyben csak a  $\Delta$ -függvények és deriváltjaik szerepelnek.

## II. Funkcionálok és funkcionáloperátorok módszere

1. §. *Nemrelativisztikusan tárgyalt egydimenziós kontinuum.* Longitudinális álló hullámokat vizsgálunk egydimenziós kontinuumban a

$$q(x) = 0, \quad \text{ha } x = 0 \quad \text{és} \quad x = l$$

határfeltételekkel. Ekkor írhatjuk

$$\left. \begin{aligned} q(x) &= \frac{1}{\sqrt{l}} \sum_{s=0}^{\infty} q_s \sin 2\pi k_s x, \quad k_s = s \frac{x}{2l}, \quad s \text{ egész szám;} \\ p(x) &= \frac{1}{\sqrt{l}} \sum_{s=0}^{\infty} p_s \sin 2\pi k_s x. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

A klasszikus mozgásegyenletek legyenek:

$$\dot{p}_s = -2\pi v_s q_s, \quad \dot{q}_s = 2\pi v_0 p_s, \quad v_s = ck_s$$



és a teljes energia

$$E = \sum_s \frac{1}{2} \{p_s^2 + (2\pi v_s)^2 q_s^2\} = \frac{1}{2} \int \left[ p^2(x) + c^2 \left( \frac{\partial q}{\partial x} \right)^2 \right] dx. \quad (21)$$

A kvantummechanika szerint (18)-hoz a

$$p_s q_{s'} - q_{s'} p_s = \begin{cases} \frac{h}{2\pi i}, & \text{ha } s = s' \\ 0, & \text{ha } s \neq s' \end{cases} \quad (22)$$

f.r.-k csatlakoznak. Ezek — mint egy egyszerű számításból következik\* — egyenértékűek a következővel:

$$p(x)q(x') - q(x')p(x) = \frac{h}{2\pi i} \delta(x - x') \quad [x, x' (0, l)\text{-ben}], \quad (23)$$

ahol  $\delta$  a Dirac-féle függvényt jelenti (vö. I. 2. §).

Amint ismeretes (22) egy  $q_1, \dots, q_s, \dots$  végtelen sok változójú

$$\psi(q_1, \dots, q_s, \dots).$$

Schrödinger-függvény bevezetésével operátoregyenletként is értelmezhető, ha

$q_s$ -t a  $q_s$ -sel való szorzás operátorával,

$p_s$ -t a  $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_s}$  differenciálás operátorával

helyettesítjük. Ez a

$$\frac{\partial}{\partial a_s} (a_s \psi) - a_s \frac{\partial \psi}{\partial a_s} = \psi$$

azonosságon alapszik. Ezután az energiatétel (21) szerint a

$$\frac{1}{2} \sum_s \left( -\frac{h^2}{4\pi^2} \right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial a_s^2} + \left( \sum_s \frac{1}{2} (2\pi v_s)^2 a_s^2 \right) \psi = E\psi \quad (24)$$

differenciálegyenletre vezet. Ennek az egyenletnek a megoldása végtelen sok változó esetén persze nem konvergens, ami összefügg a véges, sajátrezgésenként  $h\nu_s/2$  nullpont-energiával. Ezt a még nem egészen megoldott nehézséget a bevezetésben részletesen megtárgyaltuk.

Ettől eltekintve, felmerül a következő kérdés. Mi a (22) operátorelőállítás és a (24) egyenlet analogonja, ha a megszámlálható végtelen sok  $q_1, \dots, q_s, \dots$  változó helyett a  $q(x)$ -ből, azaz egymástól függetlenül variálandó változók kontinuumából indulunk ki? A válasz a Volterra-féle funkcionálmatematika segítségével adható meg.

A

$$\Psi \{q(x)\}$$

\* Vö. pl. P. Jordan és O. Klein, ZS. f. Phys. 45, 751, 1927.



funkcionál egy szám hozzárendelését jelenti egy  $q(x)$  függvényhez. Egy ilyent a  $P$  pontban differenciálhatónak mondunk, ha a következő határérték, speciális végrehajtásától függetlenül, mindig létezik: Tekintsünk egy  $q(x) + \bar{q}(x)$  variált függvényt és azt az intervallumot, amelyben  $\bar{q}(x)$  zérustól különbözik, az  $x_0 = P$  pontra húzzuk össze mialatt az  $\int \bar{q}(x) dx$  is zérushoz tart. Ekkor

$$\Psi_{q(x); P} = \lim \frac{\Psi\{q(x) + \bar{q}(x)\} - \Psi\{q(x)\}}{\int \bar{q}(x) dx}.$$

A  $\delta$ -függvény segítségével ezt így írhatjuk:

$$\Psi_{q(x); P} = \lim_{\substack{\bar{q}(x_{P'}) \rightarrow \delta(x_{P'} - x_P) \\ \alpha \rightarrow 0}} \frac{1}{\alpha} [\Psi\{q(x) + \alpha \bar{q}(x)\} - \Psi\{q(x)\}]. \quad (25)$$

Az összeg és szorzat differenciálásának közönséges szabálya érvényben marad. A második deriváltat hasonlóképpen definiáljuk:

$$\Psi_{q(x), q(x); PP_1} = \lim_{\substack{\alpha \rightarrow 0 \\ \bar{q}(x \rightarrow \delta(x - x_{P_1}))}} \frac{1}{\alpha} [\Psi_{q(x); P}\{q(x) + \alpha \bar{q}(x)\} - \Psi_{q(x); P}\{q(x)\}]. \quad (25a)$$

Ennek egy speciális esete az a második derivált, amelyben  $P_1 = P$ , amit a  $q(x), q(x); PP$  indexszel fogunk jelölni.

Ezekután  $p(x)$ -hez és  $q(x)$ -hez funkcionáloperátorokat keresünk, azaz új  $\bar{\Psi}$  és  $\bar{\bar{\Psi}}$  funkcionálok hozzárendelését  $\Psi$ -hez. Ezeket a

$$\left( \int \underline{p(x)} dx \right) \cdot \Psi\{q(x)\} \rightarrow \bar{\Psi}_J\{q(x)\},$$

$$\left( \int \underline{q(x)} dx \right) \cdot \Psi\{q(x)\} \rightarrow \bar{\bar{\Psi}}_J\{q(x)\}$$

képletekkel írhatjuk le, ahol a bal oldalon  $x$ -nek egy tetszőlegesen előírt  $J$  intervallumára kell integrálni, a  $\bar{\Psi}$  és  $\bar{\bar{\Psi}}$  funkcionálok függését ettől az intervallumtól pedig a  $J$  index fejezi ki. Ezt a hozzárendelést úgy kell megválasztani, hogy kielégítse az operátoregyenletként felfogott (23) relációt. Világos, hogy

$$\left. \begin{aligned} \left( \int_{x_1}^{x_2} \underline{p(x)} dx \right) \cdot \Psi\{q(x)\} &= \frac{h}{2\pi i} \int_{x_1}^{x_2} \Psi_{q(x); P} dx_P, \\ \left( \int_{x_1}^{x_2} \underline{q(x)} dx \right) \cdot \Psi\{q(x)\} &= \Psi\{q(x)\} \cdot \int_{x_1}^{x_2} q(x) dx \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

eleget tesz ennek a feltételnek.



A (21) energiatétel továbbá a

$$\int (-) \left( \frac{h}{4\pi} \right)^2 \Psi_{q(x), q(x); PP} dx_P + c^2 \left[ \int \left( \frac{\partial q}{\partial x} \right)^2 dx \right] \cdot \Psi = E\Psi \quad (27)$$

funkcionális integrodifferenciálegyenletet adja.

Az ortogonalitási feltétel analogonjának felállítása érdekében szükség van

$$\int \psi_E \psi_{E'} \delta\Omega$$

függvényterre vonatkozó definíciójára. Kézenfekvő definíció volna a  $(0, l)$  szakasz felosztása  $N$  közre és  $q(x)$  lépcsős függvények bevezetése, amelyek az egyes közökben rendre az állandó  $q_1, \dots, q_N$  értékeket veszik fel. Ezután az  $N \rightarrow \infty$  határátmenettel:

$$\int \psi_E \psi_{E'} \delta\Omega = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int \psi_E(q_1 \dots q_N) \psi_{E'}(q_1 \dots q_N) dq_1 \dots dq_N = \delta(E - E'),$$

itt azonban az említett konvergencia-nehézség egyelőre akadályt jelent.

2. §. *A hullámegyenletet kielégítő két kanonikusan konjugált skalár  $q$ -függvény esetének relativisztikusan invariáns funkcionál-tárgyalása.* A vákuum-elektrodinamika problematikájának előkészítése gyanánt tárgyaljuk előbb a következő egyszerűbb feladatot. Két skalár állapotmennység  $f$  és  $g$  tegyen eleget a (négydimenziós)

$$\sum_{\alpha=1}^4 \frac{\partial^2 f}{\partial x_\alpha^2} = 0, \quad \sum_{\alpha=1}^4 \frac{\partial^2 g}{\partial x_\alpha^2} = 0 \quad (28)$$

hullámegyenletnek. Tekintsük őket az  $x, y, z, t$  változók „ $q$ -függvényeinek”, amelyekre érvényesek a

$$f(P)g(P') - g(P') \cdot f(P) = i\hbar \Delta(P - P'), \quad (29)$$

f.r.-k, ahol  $\Delta$  az I. 2. §-ban definiált függvény, míg  $f$  értékei különböző pontokban egymás közt felcserélhetők,  $g$  értékei szintén. Kérdés, hogy miként lehet ezeket a f.r.-kat funkcionáloperátorok közötti összefüggések gyanánt értelmezni, a (26) operátoroknak a (23)-ba való bevezetéséhez hasonlóan.

Mivel  $g(P)$  a  $g(P')$ -vel felcserélhető, tekinthetünk olyan

$$\Psi \{g(x_1 \dots x_4)\}$$

funkcionálokat, amelyekben  $g(x_1, \dots, x_4)$  értékei most közönséges számok. Lényeges azonban, hogy  $g(x_1, \dots, x_4)$  többé nem lehet  $x_1, \dots, x_4$  tetszőleges függvénye, hanem csak olyan, amely a hullámegyenletet kielégíti. Ilyen speciális függvények tartományán belül kell maradnunk akkor is, ha  $g(x)$ -et variáljuk. Speciálisan nem lehet többé  $g(x_1, \dots, x_4)$  variációit úgy választani, hogy ezek csak egy világpont környezetében különbözzenek a nullától. Az a tény, hogy a  $\Psi$  funkcionál argumentumára a hullámegyenletet vagy általánosabban egy lineáris parciális differenciálegyenletet mellékfeltételnek előírunk, a funkcionális derivált *Volterra*-féle fogalmának megváltoztatását teszi szükségessé.

Egy ilyen változtatás kínálkozik, ha a *Volterra*-féle derivált (25) alakjában a közönséges  $\delta$ -függvényt az I. 2. §-ának gömbhéjullám  $\Delta$ -függvényével helyettesítjük, miközben emlékezzünk arra, hogy ez az I. 2. § (13) egyenlete szerint (28)-nak egy megoldása volt.



Tehát most így definiálunk egy funkcionális deriváltat

$$\Psi_{g(x_i); P} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha} [\Psi\{g(x_i) + \alpha \bar{g}(x_i)\} - \Psi\{g(x)\}]. \quad (30)$$

$\bar{g}[x_i(P)] \rightarrow \Delta(P - P')$

Mivel erre a deriváltra is érvényben maradnak az összeg és szorzat deriválási szabályai, azonnal látható, hogy (29)-et kielégíti a következő, (26)-hoz teljesen hasonló operátor-ansatz:

$$\underbrace{\left[ \int g(x_1) dx_1 \dots dx_4 \right]}_{\text{Operátor}} \cdot \Psi\{g(x)\} = ih \int_{V_4} \Psi_{g(x_i); P} dx_1 \dots dx_4; \quad (31)$$

ugyanígy  $f(x)$  operátorként az  $f(x)$ -szel való szorzást jelenti.

Ezzel teljesen megválasztottuk a jelen paragrafusban felvetett kérdést és most már tulajdonképpen célunkat, a fénykvantumelektrodinamika funkcionálegyenletét vehetjük szemügyre.

3. §. *A vákuum-elektrodinamika f.r.-i, mint funkcionáloperátorok közötti relativisztikusan invariáns relációk. Az impulzusenergia tétel, mint a Schrödinger-egyenlet általánosítása.* Ha az I. (3) egyenletével definiált  $b_1, \dots, b_s, \dots$  Fourier-amplitúdókat vezetjük be, mint független változókat, akkor a funkcionál-ábrázolás nyilvánvaló és az  $a_s$   $q$ -számnak az  $ih \frac{\partial}{\partial a_s}$  operátor felel meg. A II. 1. §-ában említett konvergencia-nehézség itt is mutatkozik, és emiatt a következők is messzemenően problematikusnak látszanak.

Ettől eltekintve is nehézség mutatkozik, ha a funkcionál-előállításunkban a mező Fourier-felbontását nem akarjuk explicite alkalmazni. Amint már az előző paragrafusban említettük, egy funkcionál argumentuma gyanánt csak olyan fizikai mező-mennyiségeket használhatunk, amelyek  $q$ -függvényekként felfogva, minden téridő-pontban felcserélhetők egymással. Az I. részben az  $F_{ik}$  térerősségekre megfogalmazott (III) f.r.-kat elfogadva, ezek a térerősségek egy funkcionál argumentumának nem alkalmasak, hanem I. 4. § (18b) vagy (19a) egyenlete szerint csak az ott definiált négy mennyiség-rendszer,  $F_{ik}^+(P)$ ,  $F_{ik}^-(P)$ ,  $E_{ik}(P)$ ,  $E_{ik}^*(P)$  egyikét használhatjuk. Ezeknek a függvényeknek alkalmazása, nevezetesen a rögzített pontra tükrözött  $F_{ik}^+$  és  $F_{ik}^-$  mennyiségeké, nagyon mesterkéltnek tűnik, mégsem sikerült őket mellőznünk.

A következő gondolatmenetet a Maxwell-egyenletek I. rész (IV) egyenlet  $F_{lm}^-(x_1, \dots, x_4)$  (egy rögzített zérus-pontra vonatkozóan antiszimmetrikus) megoldásainak funkcionáljaira visszük véghez, amelyeket tehát a

$$\Psi\{F_{lm}^-(x_1, \dots, x_4)\}$$

alakban írhatunk. Persze minden következő megfontolásban  $F_{ik}^-$  és  $F_{ik}^+$  szerepe felcserélhető, továbbá  $E_{ik}$  vagy  $E_{ik}^*$  funkcionálargumentumként való bevezetésénél szintén hasonló megfontolások érvényesek.

A probléma hasonló az előző paragrafuséhoz, csak itt a funkcionál argumentumaként több (hat) függvény lép fel *szimultán*, amelyeket a (IV) egyenletek, azaz a Maxwell-féle egyenletek egymástól függőkké tesznek. Most tehát nem lehet a térerősségek hat komponensének bármelyike szerint külön differenciálni, mert egyik térerős-



ség-komponenst sem lehet a többi nélkül variálni. Megint a  $\Delta$ -függvény, pontosabban most második deriváltja adja a megoldást. Vezessük be az I. rész (16) egyenletével definiált  $\Delta_{ik,lm}$  kifejezést, ekkor az I. 4. § szerint minden  $(i, k)$  indexpárra, rögzített  $P$ -nél az  $F_{lm}^-$ -ek egy megengedhető variációja

$$F_{lm}^-(P) = \Delta_{ik,lm}(P' - P) + \Delta_{ik,lm}(P' + P) = \Delta_{ik,lm}(P', P) \quad (32)$$

ugyanis ez kielégíti a Maxwell-féle egyenleteket és a szimmetriafeltételeket — előjelváltás a  $(P')$ -ről a  $(-P')$ -re való átmenetnél — is teljesíti. Tehát a mi  $\Psi\{F_{lm}^-(P')\}$  funkcionálunknak (30)-hoz hasonlóan hat  $i, k$  indexpárral jellemzett és ezekben antiszimmetrikus következő deriváltját definiálhatjuk:

$$\begin{aligned} \Psi'_{ik;P}\{F_{lm}^-(P')\} = & \lim_{\delta F_{lm}^-(P') \rightarrow \Delta_{ik,lm}(P', P)} \frac{1}{\alpha} [\Psi\{F_{lm}^-(P') + \\ & + \alpha(\delta F_{lm}^-(P'))\} - \Psi\{F_{lm}^-(P')\}]. \end{aligned} \quad (33)$$

Az is közvetlenül világos, hogy a (III) f.r.-k mint operátoregyenletek teljesülnek, ha a  $F_{ik}^+(P)$ -hoz tartozó operátort

$$\left( \int \dots \int \underline{F_{ik}^+(P)} dV_P \right) \cdot \Psi\{F_{lm}^-(P')\} = \frac{ihc}{16\pi^2} \int \int \Psi'_{ik;P}\{F_{lm}^-(P')\} dV_P \quad (34)$$

szerint definiáljuk, ahol  $dV_P$  az  $x_1, \dots, x_4$  koordináták négydimenziós terének térfogatelemét és  $J$  ezek tetszőleges véges négydimenziós intervallumát jelöli,

$$\int \int F_{lm}^-(P) dV_P$$

pedig operátorként egyszerűen a vele való szorzást jelenti.

Itt még helyénvaló egy rövid megfontolás, hasonló azokhoz, amelyek a II. 1. §-ban a (27) egyenlet felállításához vezettek. Mindenekelőtt egészen világos, hogyan képezhető a  $\Psi$  funkcionálunk második deriváltja; a legáltalánosabb második derivált jelölése

$$\Psi'_{ik,rs;PP_1},$$

de a következőkben csak a  $P_1 = P$  speciális esetre lesz szükségünk. Lényeges, hogy egy relativisztikusan invariáns elméletben az impulzusintegrálokat egyenértékűeknek kell tekinteni az energia-integrállal úgy, hogy a  $J_4 = -E$ ;  $(J_1, J_2, J_3) = ic\vec{E}$  négy összenergia-impulzus komponensből függő  $\Psi_{J_k}$  „saját”-funkcionálra négy szimultán másodrendű parciális funkcionál-differenciálegyenletet kapunk. Mint ismeretes, a klaszikus elektrodinamikában  $J_k$  a következőképpen fejezhető ki a térerősségekkel:

$$J_k = \int \left[ \sum_{r=1}^4 F_{kr} F_{4r} - \delta_{k4} \cdot \sum_{(rs)} \frac{1}{2} (F_{rs})^2 \right] dx dy dz.$$

A  $t = \text{const.}$  metszetet  $t=0$ -nál, azaz annál a zérus-pontnál választhatjuk, amelyet a térerősségek  $F_{ik}^+$  és  $F_{ik}^-$ -ra való szétválasztására használtunk. Ekkor a négy  $J_k$  integrál mindegyike két részre esik szét, amelyek csupán  $F_{ik}^+$ , illetőleg  $F_{ik}^-$ -től függenek, mivel



a vegyes tagokra vonatkozó integrálok szimmetria okokból eltűnnek. Így ( $k=1, 2, 3, 4$ -nek megfelelően) négy szimultán, (27)-hez hasonlóan képezett egyenletet kapunk:

$$\begin{aligned} & \left( \frac{ihc}{16\pi^2} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int \int \left[ \sum_{r=1}^4 \Psi''_{kr;4r;PP} - \delta_{k4} \sum_{(rs)} \frac{1}{2} \Psi''_{rs;rs;PP} \right] dx_P dy_P dz_P + \\ & + \Psi \int \int \int \left[ \sum_{r=1}^4 F_{kr}^- F_{4r}^- - \delta_{k4} \frac{1}{2} \sum_{rs} (F_{rs}^-)^2 \right] dx_P dy_P dz_P = J_k \Psi, \end{aligned} \quad (35)$$

ahol  $\Psi$  olyan funkcionál, amely  $F_{rs}^-(x_k)$ -től és emellett  $J_k$ -ktől, mint paraméterektől függ. Ezen egyenletek egy „zárt” sugárzási mező esetén olyan szerepet játszanak, mint a Schrödinger-egyenlet egy zárt mechanikai rendszer meghatározott kvantum-állapotában.

Amint már a bevezetésben említettük, a második rész utolsó paragrafusában előállított egyenleteket — amelyekre egyébként még nincsenek közvetlen integrációs eljárások — még az I.részben a  $q$ -függvényekre kifejtett megfontolásoknál is fokozottabb mértékben ideigleneseknek kell tekintenünk. Ettől eltekintve a funkcionálok bevezetését általában természetszerűnek tartjuk a klasszikus mezőfizika kvantálásánál, a speciális megvalósításnál felmerülő sok megoldatlan probléma ellenére is

*Fordította: Csoma Zsigmond*



# KÖNYVISMERTETÉS

M. H. BRODSKY (ed.): *Amorphous Semiconductors.*  
Topics in Applied Physics, vol. 36,  
Springer-Verlag Berlin—Heidelberg—New York 1979.

Az anyag amorf állapota iránt az utóbbi években egyre fokozódó érdeklődés tapasztalható. A gyakorlati alkalmazás szempontjából a polimerek és fémüvegek mellett az amorf félvezetők látszanak a legígéretesebbeknek. Mióta széles körben tudatosodott, hogy a félvezetős sajátságokat (elsősorban a tilos sáv létrejöttét) nem a kristályos szerkezet, hanem a kémiai kötések természete, vagyis főként a rövidtávú rend határozza meg, nagy lendülettel indult meg a már-már lezártak vélt klasszikus félvezető elmélet felülvizsgálata, s egy általánosabb, az amorf és kristályos állapotra egyaránt érvényes elmélet kidolgozása.

E tanulmánygyűjtemény szerzői az amorf félvezetőkről nyert tudományos ismeretek bizonyos rendszerezésére és a lehetőségekhez mért általánosítására vállalkoztak. A kísérleti eredmények zöme a transport, az optikai és ESR folyamatok kinetikájának tanulmányozásából származik, így a gyűjtemény csaknem valamennyi dolgozatának központi témája az amorf állapotra jellemző specifikus hibahelyek szerepének tisztázása az említett folyamatokban. A könyvet képező 10 tanulmány alapján ezekről az anyagokról a következő, eléggé koherens kép alakul ki az olvasóban.

Az amorf félvezetők megkülönböztető sajátsága (az amorf állapotot lehetővé tevő kismértékű kötősszög-fluktuáció és a viszonylagos laza, mikroüregeket tartalmazó szerkezet miatt) az éles sávhatárokkal közrefogott „üres” tilos sáv helyett a vegyérték és vezetési sáv mintegy 0,1–0,2 eV széles elmosódása, valamint az előállítási körülményektől függően  $\sim 10^{17}$ – $10^{19}$  cm<sup>-3</sup> eV<sup>-1</sup> lokalizált állapotsűrűség a tilos sávban. A lokalizált állapotok jellege szerint az amorf félvezetők két nagy csoportba: 1) a tetraéderesen koordinált, illetve 2) a kalkogénid amorf félvezetők csoportjába sorolhatók. A tetraéderesen koordinált amorf félvezetőben a tilos sávban levő állapotot a spin kompenzálatlan, ESR módszerrel mérhető szakadt kötések okozzák. A periódusos rendszer VI. oszlopába tartozó S, Se, Te kalkogén atomokból, illetve ezek más elemekkel alkotott Ge-Se, As-Se és hasonló típusú, változó összetételű ötvözetekben a lokalizált állapotok ugyan a szakadt kötésekől jönnek létre, azonban ESR jelet nem adnak, így tehát csak páros számú elektront tartalmazhatnak. A vizsgálatok szerint két kompenzálatlan spin C° szakadt kötés elektronszerű pozitív és negatív töltésű hibahely-párrá alakul át a 2C° → C<sup>+</sup> + C<sup>-</sup> exoterm folyamatnak megfelelően. (A képletben a C a kalkogén atom, a felső index pedig a töltésének a jelölésére szolgál.) A donor és akceptor jellegű töltött centrumok  $\sim 10^{18}$  cm<sup>-3</sup> koncentrációban keletkeznek, s a Fermi szintet a tilos sáv közepe táján rögzítik. Ezekben a kalkogénid anyagokban az ESR jelet adó C° szakadt kötés csak külső gerjesztéssel, pl. megvilágítással hozható létre.

A nagy hibahely-koncentráció, valamint a kristályos állapot létfeltételének az egyidejűleg létező rövid- és hosszútávú rendnek, másszóval a háromdimenziós koordinációs kényszernek hiánya, vagy enyhébb formában történő érvényesülése miatt a Fermi szint, s ezzel az elektromos tulajdonságok változtatása a donorok és akceptorok szokásos adalékolásával az amorf félvezetőkben sokáig nem volt megvalósítható. Az utóbbi néhány év legjelentősebb eredménye, hogy a szakadt kötések egy-vegyértékű atomokkal reagáltatva eltüntethetők, így a hozzájuk tartozó lokalizált állapotok is megszűnnek. Az így kiürített sávban most már kismennyiségű donor, vagy akceptor bevitelével létrehozhatók a Fermi nivót elmozdító lokalizált szintek, vagyis az így kezelt amorf félvezetők dopolhatókká válnak.

A fentiekben csak fő vonásaiban összefoglalt kép különböző aspektusainak teljesebb kibontása található az egyes fejezetekben. Az első fejezet rövid bevezetés, amely az amorf félvezetők jellemző sajátságainak bemutatása révén megismerteti az olvasót a kutatások fejlődésével, jelenlegi állapotával, s egyúttal vázolja a könyv céljait és felépítését. A második fejezet az amorf állapot kvalitatív leírására alkalmasnak látszó elméleti módszereket tárgyalja. Természetes, hogy szerzői a fő figyelmet a tilos sávban levő állapotokra, valamint a lokalizált állapotokból a kiterjedt állapotokba történő



átmenet természetének leírására összpontosítják. Végül is a nagyszámú probléma tisztázására — jobb híján — az egyes módszerek ésszerű kombinációját javasolják. A harmadik fejezet szerzője nagy hozzáértéssel és rendkívül világosan foglalja össze a tilos sávbeli állapotokról összegyűlt ismeretanyagot. Mélyrehatóan elemzi az Anderson javasolta negatív korrelációs energia feltételezésére épített modelleket, szilárd alapot teremtve ezzel a további fejezetek tanulmányozásához. A 4—7. fejezet mindegyike rendre egy-egy jelenséget tárgyal: az optikai, a transzport, a lumineszcens folyamatokat, valamint a spinfüggő hatásokat az előbbi folyamatokra. A 8. fejezet a rövidtávú rend kialakulásának kérdéseit, a vizsgálati módszereket és a szerkezetvizsgálatok konkrét eredményeit tárgyalja. A 9. és 10. fejezet a gyakorlati felhasználás szempontjából oly fontos dőpolás kérdéskörét vizsgálja, illetve az amorf szilícium hidrogén ötvözet vékony rétegekből készült napelemek gyártásának módszereit és jellemzőit ismerteti. A 6%-os átalakítási hatások, az amorf Si réteg olcsó előállítását is figyelembe véve, elfogadhatóvá teszi e fejezet szerzőjének azon reményét, amely szerint „lehetséges, hogy a nem is oly távoli jövőben amorf félvezető vékonyrétegek szolgáltatják a világ népeinek az olcsó, a környezetet nem szennyező energiát egy kimeríthetetlen forrásból”.

Az amorf félvezetők kutatásának napjainkban tapasztalható gyors fejlődése, a javasolt modellek nyilvánvaló hiányosságai, egyes nézetek háttérbe szorulása, mások előtérre kerülése arra utal, hogy az amorf félvezető anyagokra vonatkozó jelenlegi ismereteink csak átmenetiek és minden bizonnyal már a közeljövőben módosulni fognak. Ennek ellenére ez a könyv az amorf félvezető anyagok tulajdonságainak megismeréséhez, de főleg a további kísérletek megtervezéséhez nélkülözhetetlen útmutató és olyan gondolatár, amelyet nemcsak a szűk szakterület specialistái, hanem az anyag szerkezetével foglalkozók széles rétege haszonnal olvashat.

*Kósa Somogyi István*

**P. S. THEOCARIS, E. E. GDOUTOS: Matrix Theory of Photoelasticity**  
**Springer-Verlag, New York, 1979.**

A könyv a Springer kiadó „Optical Sciences” sorozatának 11. köteteként jelent meg, 352 oldalon, ebből 46 oldal arányosan összeállított irodalomjegyzék. A szerzők anizotrop anyagokban elektromágneses hullámok terjedését és polarizált fény egyszerű leírását bevezetőként előrebocsátva, egy új, egységes tárgyalást adják a fotomechanika Neumann—Maxwell törvények köré csoportosuló problémáinak. A polarizált fény leírásának modern módszereit használják, így a grafikus megközelítések közül a Poincaré-gömböt, a Wulff-hálót, a j-kört és az analitikus Müller ill. Jones kalkulust.

Elegáns és tömör tárgyalásban kimerítő részletességgel ismertetik a két- és háromdimenziós fotorugalmasság, a szórófény technikák, az interferometrikus- és holografikus fotorugalmasság problémáit. Külön fejezet foglalkozik az átlátszatlan anyagok felületén a feszültségek meghatározását célzó módszerekkel. A szerzők nagy hangsúlyt helyeztek a háromdimenziós feszültség állapot vizsgálatára, ahol a polarizált fény mátrix leírásának modern módszerei felettébb hatások.

A könyv világos szerkezetű, könnyen olvasható, a jobb megértést a 93 ábra is segíti és különösen alkalmas mint magasszintű tankönyv szakemberek számára.

*Janszky József*

**VLADIMIR M. FRIDKIN: Photoferroelectrics**  
**Springer-Verlag, New York, 1979.**

A könyv a Springer kiadó „Solid State Sciences” sorozatának 9. köteteként jelent meg, szerzője ismert szovjet kutató, a moszkvai Krisztallografiai Intézetből (171 lap, 63 ábra, 211 irodalmi hivatkozás). A monográfia a fotoferroelektromos jelenségeket tekinti át és tudatosan elkerüli a ferroelektromos anyagok fizikájának egyéb kérdéseit, ezekről több összefoglaló jelent meg az utóbbi időben (pl.: Fridkin: Szegnyetoelektromos poluprovodniki, Moszkva, 1976), a szerző teljességre még a fotoelektromosság területén sem törekedett, egyedül a fotorefrakciós hatás tárgyalható lenne külön monográfiaként.

A könyv által érintett tudományterület jelenleg viharos fejlődésben van, ez a mű aktualitását hangsúlyozza, de nem könnyítette meg a szerző munkáját.

Az előszó jellegű első fejezet után a 2. fejezet bevezetőként a fotoferroelektromos anyagok termodinamikáját ismerteti, nemegyensúlyi elektronok hatását a ferroelektromos tulajdonságokra a ferroelektromos fázisátmenet fenomenológus elmélete alapján tárgyalja. A 3. fejezetben a ferroelektromos jelenségek mikroszkopikus megközelítését találjuk. A 4. fejezet a spontán polarizáció nemegyensúlyi töltéshordozók általi árnyékolását tárgyalja.



A fotoferroelektromos jelenségek kísérleti eredményeit ismerteti az 5. fejezet, köztük a Curie pont fénykozmata eltolódását, a fotodomén effektust, nemegyensúlyi elektronok hatását a spontán polarizációra. A 6. fejezet írja le a ferroelektromos anyagok anomális fotovoltaiikus tulajdonságait, ezek előnyösen alkalmazhatók az új energiaátalakító elemek fejlesztésében. A 7. fejezet a fotorefrakciós jelenségre épül, beleértve alkalmazását háromdimenziós hologram beírására. Végül a 8. fejezet a nemegyensúlyi töltéshordozók és az árnyékolási jelenségek kapcsolatának kísérleti vonatkozásait összegzi.

J. J.

**B. O. SERAPHIN (ed.): Solar Energy Conversion**  
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1979.

Az alkalmazott fizikai sorozat (Topics in Applied Physics) 31. kötete a Nap sugárzási energiájának átalakítását a szilárdtestfizika szemszögéből tárgyalja. A napenergia akkor játszhat szerepet energia-gazdálkodásunkban, ha a jelenlegi alacsony határfokú és magas önköltségű eljárásokat felváltja a szilárdtestfizika által feltárt új lehetőségeken (pl. az optoelektronikus tulajdonságok hasznosításán) alapuló, gazdaságos naptechnológia.

A kötet hat dolgozata átfogja a számításba jövő főbb kutatási területeket. Két tanulmány foglalkozik a napenergia túlnyomó részét hordozó látható és infravörös tartományban jól átengedő, és az ennél nagyobb hullámhosszon ( $\lambda \geq 2 \mu\text{m}$ ) a sugárzást visszaverő spektrálisan szelektív felületekkel — ez főként a fototermális átalakításnál lényeges. Itt két ígéretes területre érdemes felhívni a figyelmet: az egyik a réz-szubsztátumokból készült szemcsézett bevonatok, a másik a magas hőmérsékleten ( $\sim 300^\circ\text{C}$ ) működő szelektív bevonatok alkalmazása.

Részletesen ismerteti a félvezető elektródok segítségével végzett szoláris fotoelektrolízist (az elektrokémia és a szilárdtestfizika közös határterülete!), és az — eddig jobbára csak az űrtechnikában használt —  $\text{Cu}_2\text{S}/\text{CdS}$  napcellát, amely a manapság előtérbe kerülő vékonyréteg-eljárás egyik reprezentánsa.

A napcellákban — így a  $\text{Cu}_2\text{S}/\text{CdS}$ -nál is — nagy fontosságú a fellépő heterofunkciós jelenségek vizsgálata, és kihasználásuk a cella hatásfokának növelésére — a könyv egyik fejezete ennek kimerítő tárgyalását adja mai ismereteink szintjén. A másik alaposan elemzett jelenség a töltéshordozók élettartama a (p-típusú) szilíciumban. A szilícium-cellákban ugyanis a sugárzás behatolási mélysége kb. 90%-os fény-abszorbeálás esetén mintegy  $350 \mu\text{m}$ , s ilyen vastagságú aktív rétegben a generált töltéshordozók élettartama, vagyis a diffúziós úthossz már lényeges paraméter.

A könyv fő erénye, hogy a mai napenergia-hasznosítási technológiákon túlmutatóan vázolja a gyakorlati eredményekkel kecsegtető újabb kutatási területeket. Az itt elért eredmények ismertetése mellett összefoglalja a megoldásra váró kérdéseket is. A kiadvány hasznos támpont a rokon témákban kutató szilárdtestfizikusoknak.

Rostás Sándor

**A. VÉRTES, L. KORECZ, K. BURGER: Mössbauer Spectroscopy**  
Akadémiai Kiadó, Budapest, 1979.

R. L. Mössbauer által 1958-ban felfedezett effektus, amelynek lényege, hogy a sugárzás visszalökésmentes emissziója és elnyelése véges valószínűséggel bír, lehetővé tette a hiperfinom kölcsönhatások nagypontosságú mérését, s így a szilárdtestfizika, kémia, biológia széles körben elterjedt kísérleti eszközévé vált.

Mivel mindhárom hiperfinom kölcsönhatási effektus, a kémiai eltolódás, a kvadrupol felhasadás és a Zeeman felhasadás a magot körülvevő elektronfelhő állapotáról tudósít, így a fenti mennyiségek ismeretében képet alkothatunk magunknak az elektronfelhő állapotát befolyásoló kémiai környezetéről. Tulajdonképpen ennek a gondolatnak kifejtését és az idevágó bőséges kísérleti anyag rendszerezett tárgyalását nyújtja a könyv olvasóinak.

A könyv öt fejezetre tagozódik. Az első fejezet tárgyalja azokat az alapvető fizikai és kémiai összefüggéseket, amelyekre a Mössbauer-effektus jelenségének, továbbá a hiperfinom kölcsönhatást megszabó paraméterek és a kémiai szerkezet kapcsolatának megértéséhez szüksége van az olvasónak.

A második fejezetet szentelték a szerzők az effektus tisztán kémiai vonatkozású alkalmazásainak. A kémiai eltolódás és a kvadrupol felhasadás értéke, továbbá azok érzékeny reagálása a kémiai környezet változására, egy sor törvényszerűség felismerését teszi lehetővé a szervesen, valamint komplex vegyületek elektronszerkezetét illetően. Számtalan jelenség, a központi ion alacsony- és magas-



spinű állapota, a koordinációs szám és vegyérték meghatározása, a komplex kötés kovalensségi fokának a ligandumok tulajdonságaitól való függése, a ligandumok különböző szimmetriájú elhelyezkedése kevert komplex vegyületek esetében, a — viszontkoordináció jelensége a vas, az ón, ruténium s egyéb Mössbauer magokat tartalmazó vegyületek esetében kapott, helyenként felfedezésszámba menő felismerések révén, új megvilágítást.

A Mössbauer-effektus további kémiai alkalmazása a roncsolásmentes kémiai analízis. A módszer alkalmas a Mössbauer-magot tartalmazó vegyületek kvalitatív és kvantitatív meghatározására, s mivel a vizsgálat roncsolásmentesen végezhető el, így sokszor ez az egyetlen lehetséges eljárás. Ez különösen igaz, ha különböző oxidációs állapotokban levő ionokról, vagy igen ritka, illetve drága anyag (pl. holdközet) analiziséről van szó. Kár, hogy nyilvánvaló tévedésből a fejezet címe a szervetlen vegyületek kémiáját említi csak tartalomként, holott a tárgyalás során rengeteg szerves komplex vegyület vizsgálatáról olvashatunk.

A harmadik fejezet egy eléggé különös, de izgalmas kutatási iránnyal, a befagyasztott híg oldatok tanulmányozásával foglalkozik. A hidratáció és a szolvatáció, komplex-képződés, elektronki-cserélődési reakciók, a hidrolízis folyamata, kinetikája követhetők nyomon a Mössbauer-effektus segítségével.

A Mössbauer-magokat tartalmazó biológiai anyagok, molekulák, vagy akár sejtek, sőt, szervezetek természetes célpontjai a Mössbauer-spektroszkópiának. Az e tárgykörre vonatkozó tudományos közlemények száma az évek múlásával lineárisan növekszik. A hemoglobin, mioglobin, a ferritin, a B 12 vitamin csak néhány reprezentánsa annak a nagyszámú és igen fontos biológiai molekula családnak, amelyben a vas atom biológiailag fontos funkciót lát el. E funkció fázisai, néha kinetikája, nyomon követhetők a Mössbauer-spektroszkópia révén. (Pl. a hemoglobin különböző oxidációs, vagy szénmonoxiddal, ciánnal történt mérgezett állapotai.) Ez a biológiával foglalkozó negyedik fejezet sejteti, hogy bár a biológiai anyagoknak az adott módszerrel való tanulmányozása még csak a kezdeti szakaszában van, a perspektívák sokat ígérnek.

Általános érénye a könyvnek, hogy alapos bibliográfiát, sok adatot, áttekinthető táblázatokat és a gyakorlatban alkalmazható összefüggéseket, példákkal és ábrákkal jól illusztrált tényanyagot közöl a három alapvető tárgykörből. A negyedik tárgykör, a fémekkel, ötvözetekkel foglalkozó ötödik fejezet, már inkább csak ad hoc szemelvények kissé elnagyolt, jelzésszerű bemutatása. Ez a problémakör, hacsak a híg ötvözetek, a fázisátalakulások, a mágneses és atomi rendeződések problémáira gondolunk, maga megérdemel egy külön könyvet.

Mindent összevetve, a könyv hasznos segítőtársa a kémia és a biológia területén munkálkodó, és a fizikai módszerek iránt fogékony kutatóknak.

Cser László

**G. DECONNINCK: Introduction to Radioanalytical Physics.**  
Akadémiai Kiadó, Budapest, 1978. pp. 242.

A könyv első kötete a „Nuclear Methods Monographs” sorozatnak Braun Tibor és Bujdosó Ernő szerkesztésében. A szerző előszava szerint a legkülönbözőbb szakembereknek szánta a radioaktív anyagok, a szerző előszava szerint a legkülönbözőbb szakembereknek szánta a radioaktivitásról. A széles körben ismert és alkalmazott radioaktív nyomjelzéses és neutronos aktivációs módszerrel túlmenően ugyanis az új félvezető detektorok megjelenése új analitikai lehetőségeket teremtett a nukleáris gyorsítók felhasználásával, amelyek általában roncsolásmentesek és lehetővé válik velük a kifejezetten felületi és mélységi analízis, továbbá a vékony rétegek vizsgálata és a nyomanalítika a ppm ( $10^{-6}$ ) — ppb ( $10^{-9}$ ) tartományban. A könyv kizárólag ez utóbbi, tehát a gyorsítók nyalábjában végezhető analitikai alkalmazásokkal foglalkozik, tehát a reaktorban kivitelezett neutron aktivációs módszerekkel vagy radioaktív nyomjelzés technikával nem. Ugyancsak nem tér ki a gyors neutronok alkalmazására sem, bár ezeket általában szintén megfelelő gyorsítók szolgáltatják, hanem csak gyorsítókból eredő töltött részecske-nyalábokkal és nagy energiájú fotonokkal foglalkozik.

Mindenekelőtt a magreakciókkal kapcsolatos alapvető ismereteket (kinematika, reakció mechanizmusok, hatáskeresztmetszetek, magreakciók típusai) tárgyalja a szerző (1. fejezet), majd a töltött részecskék anyaggal való kölcsönhatását (2. fejezet). Bár ez utóbbi szintén alapozó jellegű fejezet, mégis ebben ismerteti a töltött részecskék által kiváltott karakterisztikus röntgen-sugárzáson alapuló elemi analitikai módszert (az ún. PIXE).

A további fejezetek a minta, ill. a minta atommagjai és a töltött részecskék vagy fotonok kölcsönhatása során kilépő részecskék típusa szerint csoportosítva tárgyalják a különböző módszereket. Így külön fejezet szól a töltött részecskék ru-



galmas szórásáról, ill. az ezen alapuló módszerekről (RBS, a Rutherford-szóráson alapuló analízis), egy másik a gamma detektáláson alapuló eljárásokról. Ez utóbbiban töltött részecske és fotoaktiválási módszerek és a prompt gamma kibocsátás alkalmazásai is helyet kapnak. Egy további fejezetben kerülnek tárgyalásra a prompt kibocsátott töltött részecskék és neutronok analitikai alkalmazásai. Végül az utolsó fejezet az előzőekben ismertetett technikák értékelését, egymással való összehasonlíthatóságát adja.

Mint az előszóban is írja a szerző, az instrumentális részletek, az adatok feldolgozása és a más analitikai módszerekkel való összehasonlíthatóság hiányzik a könyvből, viszont mindenütt megtaláljuk az analízishez szükséges gyakorlati formulákat és a kidolgozott konkrét példákat számításokkal. Tény az is, hogy míg a neutron aktivációs analízisről számos könyvet, tanulmányt írtak, hasonlóan a radioizotópos módszerekről is, a gyorsítók alkalmazásával végzett analitikai lehetőségekről nagyon kevés monográfia áll rendelkezésre. Ugyanakkor kritikailag meg kell jegyeznem, hogy éppen a gyakorlati használhatóság szempontjából a könyv anyagának elrendezését nem tartom a legserencsebbnek. Az alkalmazásokat szem előtt tartva, ugyanis nem a legfontosabb, hogy a minta és nyaláb kölcsönhatásából milyen sugárzás lép ki (amely szerint lényegében a fejezetek el vannak rendezve), hanem az, hogy a szóban forgó analitikai eljárások mire használhatók (nyomanalítika, mélységi analízis stb.). A könyvben sokszor meg sem találjuk az egyes analitikai módszerek nemzetközileg elterjedt elnevezését, rövidítéseit (pl. RBS = Rutherford backscattering-módszer, a PIXE-t — Particle induced X-ray emission. A név- és tárgymutatóval, a 13 hasznos táblázattal a könyv végén, mégis széles körben, a gyakorlati szakemberek által is használható kézikönyvet adott közre a kiadó.

*Berényi Dénes*

**J. D. LAWSON: The Physics of Charged-Particle Beams.**  
Clarendon Press, Oxford, 1977—78. pp 462.

A részecske-nyalábok kérdéseit sokszor tárgyalták már instrumentális oldalról: a gyorsítók, elektron- és ion-nyalábok kezelése és ezek optikája oldaláról vagy a számos alkalmazás egyikét vagy másikat ismertette. Lawson könyvében ezekhez viszonyítva egészen más megközelítést választ. A részecske-nyalábok fizikája felől közelíti meg a kérdéseket: a nyalábok jellemzői, az ezekkel kapcsolatos alapvető fogalmak és elméleti kezelésük, ez a könyv tárgya.

Amikor például a bevezető fejezet után a nyaláboptika és a fókuszáló rendszerek tárgyalására kerül sor, ne várja senki a mágneses vagy elektrosztatikus lencsék instrumentális leírását, de olyan formulákat se, amelyek ilyen berendezések tervezésénél közvetlenül felhasználhatók. Megtaláljuk viszont a töltött részecskék mozgásának törvényeit mágneses és elektromos térben, és ezek alapján a képek kialakulását, a nagyítást az elektromos és mágneses lencsékben.

Az előzőhöz hasonlóan tárgyalják a következő fejezetek a lamináris, majd a non-lamináris nyalábok törvényszerűségeit, a nyalábokban bekövetkező szórási és veszteségi jelenségeket, végül a nyaláb-instabilitásokat.

Igen hasznos az olvasó számára, hogy minden fejezet, sőt az alfejezetek is külön bevezetéssel kezdődnek. A függelékben bizonyos elméleti részleteket, felhasznált alapvető formulák levezetését találjuk. A könyv végén a részletes irodalmi jegyzéken kívül tárgymutatót, a könyv elején pedig a gyakran használt jelek, szimbólumok jegyzékét találjuk.

A könyv nagyon hasznos az olyan instrumentális vagy alkalmazási területek, problémakörök elvi megalapozásául, mint a részecskegyorsítók fizikája és technikája, ion- és elektronágúgy szerkesztése, elektronoptika, plazmafizika, és i. t.

*Berényi Dénes*

**HEINRICH HORA: Nonlinear Plasma Dynamics at Laser Irradiation.**  
Lecture Notes in Physics, Vol. 102.  
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1979.

A nagy intenzitású lézernyaláb és a szilárd test (valamint a plazma) kölcsönhatását nagy számú nem-lineáris effektus jellemzi. A szerző tehát a szerteágazó elméleti és kísérleti ismeretanyag szelektálására kényszerült. Nem foglalkozik a könyvében pl. a következő problémákkal: kristályhibák keltése és megszüntetése lézer-besugárással, olvasztás és megmunkálás lézer segítségével, gázkisülés gerjesztése lézerrel; hogy csak néhány, elvi és gyakorlati szempontból fontos témát említsünk. A szerző a figyelmét a nagy intenzitású lézersugár és a plazma kölcsönhatására összpontosítja; könyve „mag-



fúzióra orientált". (Noha csupán az utolsó, rövid fejezet foglalkozik közvetlenül a fúziós célú plazma lézer-fűtésével ill. -kompressziójával.)

A plazma-jelenségek leírása, a lézer és a plazma kölcsönhatásának az ismertetése renkívül alapos és részletes. A recenszens feleslegesnek véli azonban az ilyen témájú (és színvonalú) könyvben a hidrodinamikai Euler-egyenlet, a kontinuitási-egyenlet vagy a Bernoulli-egyenlet egyszerű (legegyszerűbb) alakjának a *leszármaztatását*. Ilyenformán a könyv színvonala nagyon ingadozó: egyes fejezetei csupán elemi fizikai és matematikai alapképzettséget tételeznek fel, más fejezeteinek a megértéséhez viszont alapos plazmafizikai és lézerfizikai jártasság szükséges. Ez valószínűleg abból adódik, hogy a könyv gerincét a szerző azonos című előadásai képezik, és így — helyenként talán túlzott mértékben — az egyetemi előadások metodikájához és stílusához igazodik. Sokat tanulhat azonban a könyvből a kezdő lézer- vagy plazmafizikus csakúgy, mint az e témakörökben már jártasabb szakember is.

A részletes bevezető után a szerző a mikroszkopikus (vagyis korpuszkuláris) plazmaelmélet elemeit ismerteti. (Liouville-egyenlet, plazmafrekvencia, Debye-féle leárnýékolási távolság, plazmonok, ciklotron-frekvencia, az ütközések elemi elmélete.)

A plazmajelenségek magnetohidrodinamikai tárgyalásának az előkészítése a következő fejezet témája; címe: „Hidrodinamika”. Alfejezetei: az Euler-féle mozgásegyenlet; a stacionárius Bernoulli-egyenlet; a kontinuitási egyenlet; a kompresszibilitás; az energia-egyenlet.

A hidrodinamikai egyenletek alapján kiszámítható, milyen sebességgel növekszik egy plazma-gömb sugara, ha térben állandó (de időtől függő) teljesítményt abszorbeál. (Ezt az ún. „self-similar” modellt egyébként a táguló Világegyetemre dolgozta ki E. A. Milne csaknem ötven évvel ezelőtt.) A szerző a szokásosnál egyszerűbb matematikai és fizikai megfontolásokkal jut el a végformulákhoz, amelyek meglepő pontossággal írják le a mérési eredményeket.

„A plazmadinamika és a Lorentz-elmélet” című fejezetben a plazma Schlüter-féle kétfolyadékos modelljét ismerteti a szerző. Különösen tanulságos a nem-lineáris és a relativisztikus elnyelés tárgyalása. Alfejezetei: A Schlüter-féle mozgásegyenlet; a Schlüter-féle diffúzió-egyenlet; az elektrodinamikai egyenletek; a plazma törésmutatója és elnyelési együtthatója; nem-lineáris és relativisztikus abszorpció.

Az előző fejezetek tartalmát a plazma elemi elméletének (ill. a következő fejezetek előkészítésének) tekinthetjük. A plazma nem-lineáris elektrodinamikája (tehát a nagy intenzitású lézersugár és a plazma kölcsönhatásának az ismertetése) a további fejezetek tárgya. Lenyűgöző az ismertetett anyag bősége: hullámok terjedése inhomogén plazmában, a plazma Maxwell-féle feszültségtenzora, impulzus- és energia-csere az elektromágneses tér és a plazma között (a nem-lineáris effektusok figyelembevételével), termokinetikai erők, kavitonok, rezonancia-abszorpció, a lézernyaláb önfokuszálása plazmában, magfúziós célú plazma fűtése és kompressziója lézerrel.

Magyar vonatkozása miatt érdemes kiemelni a szerző „állásfoglalását” az elektromágneses energia-impulzus-tenzor ill. a fotonimpulzus Abraham- ill. Minkowski-féle alakjával kapcsolatos vitában. Megmutatja, hogy a foton impulzusa plazmában az Abraham- és a Minkowski-féle formulával nyert érték számtani közepe.

A recenszens szívesen ajánlja a könyvet mindazoknak, akik lézerfizikával, plazmafizikával, a lézer és a plazma kölcsönhatásaival, vagy általában a nem-lineáris effektusokkal foglalkoznak.

Szabó János

A. A. OLINER (ed.): Acoustic Surface Waves.  
Topics in Applied Physics, Vol. 24.  
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1978.

Mint hogy az akusztikai (rugalmas) hullámok terjedési sebessége az elektromágneses hullámok sebességének mindössze kb. százazred része, azért azonos frekvencián a hullámhosszuk is ugyanilyen nagyságrendben kisebb. Megfelelő hullámátalakítók segítségével (elektromágneses hullám → akusztikai hullám → elektromágneses hullám) tehát az elektromágneses jel megérkezését — elvben tetszőleges ütemben — késleltethetjük. A térfogati akusztikai hullámot azonban terjedés közben már nem — vagy alig — befolyásolhatjuk. A felületi akusztikai hullámok egyik előnyös tulajdonsága éppen az, hogy terjedés közben befolyásolhatók, és hogy az ilyen hullámokat hordozó kristályfelületek számos fizikai tulajdonsága (pl. periodikus sűrűség-ingadozás) használható.

A könyv (több szerző munkája) rendkívül alaposan ismerteti a rugalmas felületi hullámok tulajdonságait, gerjesztésük módszereit, alkalmazásuk lehetőségeit. A szerzők a kísérleti módszerekre és az alkalmazásokra helyezik a hangsúlyt, de mindig világosan kifejtik az alkalmazások elvi-elméleti alap-



jait. Technikai részletkérdésekre nem térnek ki, de hasznos észrevételeket, útmutatásokat talál a könyvben a téma iránt érdeklődő kísérleti fizikus és mérnök.

A felületi akusztikai hullámok széleskörű alkalmazási lehetőségeit a hetvenes évek elején ismerték fel; érthető tehát, hogy a szerzők „új” eredményeket ismertetnek. De érdemes külön hangsúlyozni (és ez az egész sorozatra jellemző), hogy az olvasó a könyvben a témakörre vonatkozó ismereteket a kézirat lezárásáig nyomon követheti. Bizonyosságul álljanak itt a fejezetcímek:

1. Bevezetés. 2. A felületi hullámok típusai és tulajdonságai. 3. A felületi hullámok szűrésének alapelvei. 4. A jeltovábbítás alapjai. 5. Felületi hullámokat továbbító hullámvezetők. 6. Az anyagi tulajdonságok hatása a felületi hullámokra. 7. A felületi hullámokkal kapcsolatos eszközök technikája.

És ízelítőül néhány alcím: Akusztikai — elektromos transzport-függvény. Hőmérsékleti stabilitás. Oscillátor-stabilitás. Mire jó a hullámvezető? A felületi tulajdonságok hatása a felületi hullámokra. Nem-lineáris effektusok az alapprofrekvencián. Röntgensugár-litográfia.

Összefoglalva: hasznos, érdekes, jó szakkönyv. Azok is sokat tanulhatnak belőle, akiknek nem a könyv témája a közvetlen szakterületük.

*Szabó János*

**The einstein Myth and the IVES PAPERS R. HAZALETT and D. TURNER (ed.):  
Devin—Adair, 1979. (pp. 312)**

Ez az impresszív méretű kötet H. I. Ives amerikai optikusnak a relativitáselméletet támadó írásait és más szerzők néhány ezzel kapcsolatos dolgozatát tartalmazza. A címdalon azt olvassuk, hogy a munka a Téridő-Tanulmányok Intézetében készült. Különös intézet lehet ez: a szerzők jelen esetben éppen tagadják a téridő koncepcióját. Különös maga a kötet is, amelynek hitelét a szerző optikai munkáiért átnyújtott emlékérem kísérőlevelének másolatán Truman elnök aláírása iparkodik bizonyítani. Nem kevésbé meggyőző érv a fizikus számára, mint az a méltatás, amely a kötet végén a két szerkesztőnek a koreai háborúban és a II. világháborúban végbevitt hőstetteit ismerteti. És ami e két érv között található: a relativitáselmélet tagadása, makacsul ismételt tévedések az egyidejűségről, a fénysebesség méréséről és a nem-euklidészi geometriáról.

Nem Ives az első szerző, aki saját aligha alapvető kísérleti fizikai eredményein felbuzdulva a relativitáselmélet szűklátókörű megreformálását tűzi ki céljául. A vita régen lezárult; az érvek és ellenérvek felsorakoztatása nem lehet e könyvismertetés feladata. Einstein túlélte Ivest, mint ahogyan a relativitáselmélet munkaeszköze marad annak a fizikusnak is, aki régebben elfelejtette az egykori támadások történetét.

— Negyvenhét évvel az euklidészi párhuzamosság-posztulátum szigorú bizonyításának megjelenése után — írják a szerkesztők a XVI. lapon — az akadémiai világ még nem vesz tudomást erről a bizonyításról. — A kötet valóban tartalmazza J. J. Callahan 1931-ben megjelent munkáját, amelyben a szigorú (de hibás) bizonyítás szerepel. Nem kevesebbet állít Callahan, mint azt, hogy az euklidészin kívül más geometria nem létezik! Ne tessék a gömb vagy a hiperboloid felületére geometriai alakzatokat rajzolni, mert azok nemlétezését Callahan — íme — bebizonyítja.

A relativitáselmélet kísérleti alapjai iránt érdeklődő olvasó örömmel fedezi fel a kötetben újranyomott dolgozatok között G. Sagnac, A. A. Michelson és H. G. Gale a fény terjedésére vonatkozó interferometriai vizsgálatait. Ez utóbbi fejezetek azonban mit sem vonnak le a kötet tévedéseinek súlyából.

*Perjés Zoltán*

**HARTMUT M. PILKUHN:  
Relativistic Particle Physics  
Texts and Monographs in Physics  
Springer-Verlag, New York—Heidelberg—Berlin, (1979) 247 oldal**

A relativisztikus részecskefizika az elmúlt három évtizedben olyan elegáns és hatékony számítási metodikát fejlesztett ki, amely nem csupán az elmélet hatékonyságát terjesztette ki az energialétra elképesztően magas fokáig, de követendő és követhető példát kínált a magfizika, statisztikus fizika, molekulafizika számára is. A szerző, a karlsruhei egyetem professzora ezt a matematikai módszert mutatja be tömör és elegáns megfogalmazásban. A Dirac-egyenletől és a kvantum-elektrodinamikától kiindulva eljut a hadron-állatkert különleges viszonyaihoz kifejlesztett algebrai és analitikai eljárásokig. A könyv nem romantikus bevezető a részecskefizikába, nem is vezet be a ma divatos elektro-



gyenge kölcsönhatások, kvantumkromodinamika, nagyszabású egyesítés kusza képletdzsungelébe (ugyan röviden mindenre utal). A könyv bizonyos szempontból több ennél: a jelöléseknek, alapképleteknek, számítási módszereknek és elméleti eredményeknek olyan tömör és szabatos kompendiuma, amelyet sokszor levez majd könyvespolcáról a kutató. A csábítóan pongyola stílusú amerikai monográfiák mellett külön értéke van az ilyen megbízhatóan következetes feldolgozásnak.

*Marx György*

**M. DEMIANSKI (ed.): Physics of the Expanding Universe**  
**Lecture Notes in Physics, Vol. 109.**  
 Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1979. 210 oldal

A könyv az 1978 szeptemberében Jodłowy Dwór-ban tartott, úgynevezett Krakói Kozmológiai Iskolán elhangzott nyolc előadás szövegét tartalmazza a kozmológia legkülönbébb területeiről. Így a könyv nem képez egységes egészet, fejezetei egy-egy témakör részletesebb összefoglalását tartalmazzák.

Az első fejezetet MacCallum (London) írta „Az anizotróp, térben homogén kozmológiák matematikája” címmel. Az 56 oldalas tanulmányban elsősorban a Lie algebrákról és azok Bianchi-féle elméletéről esik szó. Az előadásban ismertetett matematikai apparátus nélkülözhetetlen segédeszköz azok számára, akik a kozmológia aktuális kérdéseivel érdemben foglalkozni kívánnak.

A második fejezetben J. B. Zeldovics (Moszkva) ismerteti „A gravitációs térben keletkező részecskék” kutatására vonatkozó legmodernebb eredményeket.

„A homogén kozmológiai modellek és a viszkózus disszipáció” kapcsolatáról ír N. Caderni (Cambridge) a harmadik fejezetben, amely a kozmológiának egy érdekes újszerű felosztását is tartalmazza.

A 4. fejezetet ismét J. B. Zeldovics írta „A kozmológiai mikrohullámú háttérsugárzás és a galaxisok keletkezése” címmel, amelyben az úgynevezett maradványsugárzás sajátosságainak az Univerzum korai állapotára vonatkozó konzekvenciáit tárgyalja.

Hasonló témával foglalkozik R. B. Patridge (USA) „A kozmológiai anizotrópia a mikrohullámú háttérben” című cikke is, amely az előzővel ellentétben inkább a megfigyelés oldaláról közelíti meg a problémát.

A hatodik fejezetet G. De Zotti (Padova) írta „A kozmikus háttérsugárzás spektrumának kényszerű eltorzulása” címmel. A szerző rövid cikke az előző előadáshoz hasonlóan a háttérsugárzás észlelt és elméleti spektrumának összehasonlításával foglalkozik.

„A galaxisok halmazokba való rendeződésének” kérdéseivel foglalkozik G. Dautcourt (Potsdam) cikke, amelyben egységes módon tárgyalja a galaxisok keletkezésének különféle módzatait.

Az utolsó (nyolcadik) cikk a kissé romantikus hangzású „Kérdések a csalhatatlan bölcshez” címet viseli (írta M. Heller). Ez az előadás a Fridman és Lemaitre közötti prioritás kérdéseit taglalja.

A könyv igen magas szinten ismerteti a modern kozmológia néhány aktuális problémáját. Olvasását így elsősorban azoknak a fizikus és csillagász kutatóknak ajánlhatjuk, akik a témakörrel alkotó módon kívánnak foglalkozni.

*Marik Miklós*

**WOLFGANG PAULI: Wissenschaftliche Briefwechsel mit Bohr, Einstein, Heisenberg**  
 u. a. Bd. I. 1919—1929. Herausgegeben von A. Hermann, K. Meyenn, V. F. Weisskopf

„Sources in the History of Mathematics and Physical Sciences, 2”  
 Editors: M. J. Klein—G. J. Toomer  
 Springer-Verlag, New York—Heidelberg—Berlin, 1979. 577 p.

Wolfgang Pauli (1900—1958) tudományos levelezésének ez a kötete a kvantummechanika kialakulásának hőskorából származó dokumentumokat tartalmazza. A kötet 241 levelet közöl az alábbi időrendi és tárgyköri bontásban: I. 1919. Az általános relativitáselmélettel kapcsolatos kutatások. II. 1920. A „relativitáselméleti cikk” és az első atomfizikai munkák. III. 1921. Disszertáció a hidrogénmolekula-ionról. IV. 1922. Göttinga—Hamburg—Koppenhága. V. 1923. Az anomális Zeeman-effektus. VI. 1924. Útban a kizárási-elv felismerése felé. VII. 1925. A „kvantummechanikai cikk” és a göttingai mátrixmechanika. VIII. 1926. A forgó elektron és a kvantummechanika általánosítása.



IX. 1927. A koppenhágai interpretáció és a kvantumelektrodinamika. X. 1928. Zürich — A kvantumelektrodinamika nehézségei. XI. 1929. Az erőterek kvantumelméletének rendszeres kiépítése.

A Pauli által, illetve Paulihoz írt levelek bemutatása mellett a kötet függelékben közli a gyűjtemény kiadásának körülményeit, Pauli életrajzi — időrendi adatait 1900 és 1929 közötti időre, publikációs listáját 1919 és 1929 közötti cikkekről, a levelezés pontos kronológiai adatait, a levelek partnerek szerinti felsorolását, valamint a levelezésre vonatkozó név és tárgymutatót.

Minthogy ez a különös gyűjtemény — a várható további kötetekkel — a filológiai-irodalomtörténeti rekordokkal összemérhetőnek ígérkezik, felmerül a kérdés: mit várhat a szűkebb tudomány (a fizika, az elméleti fizika), a tágabban értelmezett tudomány (pl. tudománytörténet) és éppen az atomfizika forradalma nyomán a filozófia ettől a kiadott levelezéstől. Van-e olyan lényeges dolog, amit nem lehet megtudni (olyan részletességgel) a szakfolyóiratokban megjelent immáron klasszikus cikkekből, de megtudható a levelekből. Erre a kérdésre válaszol Armin Hermann, a levelezést kiadó tudománytörténész, amikor a kötet elé írt bevezető tanulmányában felsorolja azokat a szembeszökő tényeket, amelyek ezen a téren az olvasó elé tárulnak. A levelek olvasói tanúi lehetnek azoknak a gondolatmeneteknek, hosszas vitáknak, amelyek a klasszikus mechanikai fogalmak atomfizikai fikciói helyére a ténylegesen mérhető új mennyiségeket és ezáltal az új, teljesebb modelleket megszülték. A szakfolyóiratok ezt csak jóval szűkebben tükrözik. Pauli metszően kritikus szellemét, amitől a Heisenberg féle nem-lineáris térelmélet születésének idején hallottunk — mi későn született kortársak először, és — utoljára, a levelezés megismerése során egy kielégíthetetlen tudásvágyú, elhivatott, rendkívül aktív fizikus nélkülözhetetlen munkaeszközeként ismerjük meg.

A kötet újabb — eddig talán a legsajátosabb — forrásmunka a kvantummechanika történelmi analízise számára, mely fizikus, tudománytörténész és a fizika iránt érdeklődő filozófus szakemberek számára felbecsülhetetlen jelentőségű információk tárháza.

*Abonyi Iván*

**H. ZINGL, M. HAFTEL and H. ZANKEL (ed.): Few Body Systems and Nuclear Forces II. Proceedings, Graz 1978. Lecture Notes in Physics 87. Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1978.**

Ez a kötet a hasonló címen Grazban, 1978-ban tartott konferencia kiadványának második része. A konferencia fő előadásainak szövegét és néhány határidő után beérkezett cikket tartalmaz.

A konferencia világosan tükrözte azt aényt, hogy az elmúlt húsz évben jelentősen kiterelbelyesedett az a témakör, amelyet összefoglalóban „néhány-test probléma”-ként szoktunk emlegetni. Húsz esztendővel ezelőtt ez a fogalom elsősorban alacsony energián végbemenő két- és három-nukleon folyamatokat jelentett, amelyeket nem-relativisztikus két-részecske potenciálok segítségével írtak le. A jelen kötetben ezzel szemben a magerőknek közepes energiákon (azaz a mezon-nukleon fizikában) játszott szerepére esik a fő hangsúly. Sőt, meglehetősen nagy súllyal szerepelnek kifejezetten részecskefizikainak minősíthető témák is. Ez nem meglepő, hiszen a mezon-gyárak működése állandó kihívást jelent az elméleti fizikusok számára, hogy vizsgálják alaposan a mezonikus szabadsági fokok szerepét. Ebből a perspektívából foglalkozik a hadron-hadron kölcsönhatásokkal a könyv első fejezetét alkotó hét dolgozat. Külön ki kell emelni C. de Tarnak a magerők kvarkszerkezetére vonatkozó munkáját.

A második fejezetben a pion-kölcsönhatásokról és a pionok keletkezéséről van szó. Ezt a témát különösen időszerűvé teszi a relativisztikus nehéz-ion reakciókban esetleg fellépő pionkondenzáció sokat vitatott kérdése.

Talán kicsit konvencionálisabb oldalról közelíti meg a három- és négy-test problémát a harmadik fejezetbe sorolt nyolc dolgozat. Ez a téma a harmadik fejezetben szereplő munkák nagy erénye: azt foglalják össze, hogy mik az új — elméleti és kísérleti — fejlemények olyan problémák terén, amelyek már régebben foglalkoztatják a téma szakértőit. W. Thirring például három töltött részecske szórására vonatkozó egzakt eredményeket közöl — bár ezek numerikusan még nem kidolgozottak, de jól mutatják azt a fejlődést, amely a szükséges matematikai apparátus megteremtésében végbement.

Az N-részecske rendszerekre való kiterjesztés — amelyet a negyedik fejezet tartalmaz — régóta megszokott része az ilyen típusú köteteknek. Itt újdonságot jelent E. F. Redish dolgozata, aki a néhány-test módszereknek más területeken (pl. atom- és molekula-fizika, kémia, statisztikus mechanika) való alkalmazását tekinti át.

Sajátos szemszögből kap összefoglalót az olvasó, ha áttanulmányozza M. J. Moravcsiknak „A néhány-test probléma húsz éve” című záró-előadását. A kötet végén 19 határidő után beérkezett cikk szerepel. Ezeket a legújabb eredmények közül való szemelvényeknek foghatjuk fel.



A kötetben szereplő dolgozatok — mivel konferenciára készült előadások — meglehetősen inhomogén színvonalat mutatnak, nem készültek azonos igénnyel. Annyi mindenesetre kétségtelen, hogy ez a kiadvány nem forgatható tankönyvként: elsősorban arra alkalmas, hogy a téma szakértői lemérhessék az utóbbi időben a néhány-test probléma vizsgálatában végbement fejlődést.

*Fái György*

**C. CIOFI degli ATTI and E. DE SANCTIS (ed.): Fed Body Systems and Electromagnetic Interactions Proceedings, Frascati 1978. Lecture Notes in Physics 86. Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg,—New York, 1978.**

Az elektromágneses tér tulajdonságait több, mint száz éve részletesen ismerik a fizikusok. Ezért az elektromágneses szondák a legalkalmasabbak arra, hogy segítségükkel bonyolultabb rendszereket vizsgáljunk kísérletileg. A néhány-test rendszerek sajátosságairól például fontos információkat szerezhetünk rugalmas és rugalmatlan, valamint kvázi-rugalmas szórás kísérletekkel és olyan kísérletekkel, amelyek során a rendszerek alkotóelemeikre esnek szét.

A néhány-test rendszerek elméletének és a kísérleti technikának a fejlődése tette szükségessé, hogy Rómában, 1978-ban konferenciát tartsanak a témáról. Ez a konferencia — amelynek az anyagát a jelen kötetben gyűjtötték össze —, műhely-jellegű volt, olyan tehát, ahol a hangsúly áttekintő előadások helyett a résztvevők munkájára, együttes gondolkodására esett abban a reményben, hogy ebből (a konferencián vagy később) új eredmények származnak majd. A résztvevő elméleti és kísérleti fizikusok a következő témákat vitatták meg: 1. A nukleon-nukleon kölcsönhatás; 2. Kicsérelő áramok és  $N^*$  rezonanciák magokban; 3. Néhány-test rendszerek és könnyű magok elektro- és fotodezintegrációja; 4. Három-test rendszerek szerkezete; 5. Rugalmas és kvázirugalmas szórás  $^3\text{H}$ -on és  $^3\text{He}$ -on; 6. Kitekintés.

Természetesen az egyes szekcióüléseken hosszabb előadásokra is sor került. Ezek közül gyűjtöttek össze 24-et a szerkesztők a konferenciáról készült jelen kiadványban. Bevezetőül A. M. Green rövid áttekintését közlik a nukleon-nukleon potenciálról.

O. Benhar és C. Ciofi degli Atti a maganyagszámításokból a nukleon-nukleon kölcsönhatásra vonatkozóan kapható információkat elemzik. Áttekintik a nukleon-nukleon korrelációk leírására vonatkozó különböző módszereket is. A fenti hagyományos témák mellett helyet kap a nukleon szerkezete és a nukleon-nukleon kölcsönhatás közötti kapcsolat vizsgálata is. M. Gari és D. O. Riska kicsérelő áramokkal foglalkozik, A. M. Green pedig második, a kötetben szereplő dolgozatában a magokban fellépő nukleon-rezonanciákról értekezik tömören és világosan.

*Fái György*

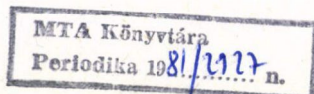
**H. KRESSEL (ed.): Semiconductor Devices for Optical Communication Topics in Applied Physics Vol. 39. kötet Springer-Verlag, Berlin, 1980.**

Az első gyakorlatilag működő, a távbeszélő hálózatban alkalmazható optikai hírközlő rendszert a Bell Telephone Laboratories dolgozta ki. Kipróbálására reális körülmények között Csikágóban került sor. Az USA-ban, Angliában és Japánban hasonló próbálkozások folynak. A sikeres bemutatkozás azt ígéri, hogy az 1977 májusa óta működő prototípus 1980. folyamán a gyors termelés állapotába kerül. Az első prototípus részletes ismertetése a kötet utolsó fejezetének tárgya. Önállóan is megjelenhetne valamelyik szaklapunkban.

A könyv első nyolc fejezete a szál-hírközlő rendszerek komponenseire vonatkozó specifikus területekkel foglalkozik. A bevezető, első fejezetet maga H. Kressel írta, ez részben történelmi ismertetés. Talán legszembeütőbb benne az a két grafikon, amelyek közül az egyik 1965—1980 évek függvényében a szálvesztesség, ill. a diszperzió rohamos csökkenését mutatja.

A második fejezet a lézerdíódákat és a LED-eket tekinti át. Itt kerül sorra  $\sim 0,82$  és  $\sim 1,2\mu\text{m}$ -nél emittáló heteroátmenetű struktúrák technológiájára, emissziós teljesítményére, hatékonyságára, a sugárforrások és a megbízhatóság, valamint a LED modulusának kérdésére. A lézer dióda modulálásának tárgyalása a 7. fejezetre marad.

A 3. fejezet a fotodetektorokat tekinti át. Szilikon és p-i-n fotodíódák a legkorszerűbb eszközök az optikai hírközlésben, mivel spektrális válaszuk  $\sim 0,82\mu\text{m}$ -nél nagyon nagy, (az általában az AlGaAs készülékek spektrális emissziója). Azonban az  $1,2\mu\text{m}$  szomszédságában működő rendszerek esetén a szilikonénál kisebb sávzélességű félvezetőt kell fotodetektorként használni. A germánium





készülékek megfelelnek, de a direkt sávzélességű anyagokból, így JnGaAsP-ből készített fotodiódák potenciálisan jobbak.

A felhasznált források és fotodetektorok áramkör viszonyait a 4. és 5. fejezet tárgyalja. Az előbbi a félvezető felépítését (fotodióda, erősítő és szűrők) diszkutálja. A félvezető megtervezésének követelménye, hogy minimális legyen az az optikai teljesítmény, amely a fotodiódát úgy táplálja, hogy elérje a kívánt bit hiba arányt a digitális rendszerben (vagy jel-zaj viszonyt analóg rendszerben). Ezenkívül költség, kezelhetőség és a dinamikai tartomány szabja meg a felvevő kiválasztását.

A LED-eket és a lézerdiódákat felhasználó transducer az 5. fejezet anyaga, beleértve a LED kivezetések linearizálásának módszerét is.

Nyilván nagyon fontos, hogy a diódák által a szálba emittált sugárzás olyan sok legyen, amennyi csak lehetséges. A 6. fejezet azt ismerteti, hogyan kell direkt módon, ill. közbelső optika felhasználásával a fényforrásokat a szálakhoz csatlakoztatni. Kitérnek, hogy egy fényforrást rövid szállal permanensen érdemes csatolni a dióda-köteghez. Ez a szál később egy hosszú kábelhez csatlakozik. Két összekötött szál mechanikai rossz illesztéséből származó csatlási veszteség szintén analízisra kerül.

A lézer dióda egyik fő előnye a többi lézerrel szemben, hogy végpontján GHz tartományba nyúló értékeknél modulálható. Azonban a lézerdiódák komplex dinamikai viselkedése miatt a lézer-külső áram szomszédságában a nagy modulálhatóság csak megfelelően beállított diódával érhető el. Továbbá a rezonancia jelenségek erősítik a lézer modulációt és a fellépő zajforrásokat. Ezek és más, a lézer modulálásával kapcsolatos effektusok a 7. fejezetben szerepelnek.

A lézerdiódákat (vagy LED-eket) felhasználó optikai hírközlő rendszerek digitálisként könnyebben működtethetők, mint analóg modulációs rendszerben. Ennek az az oka, hogy a fényforrás linearitása messze kevésbé kritikus a digitális rendszer minőségével szemben. Mindamellettt kvalitatív analóg modulálás is lehetséges, de függ a használt berendezés típusától és az operatív karakterisztikáktól. A 8. fejezet elméletileg analízálja a lézer diódák analóg modulálását, a lézernek hő és elektromos ellenállása által adott korlátokkal.

(T. Gy.)

#### **P. BRÄUNLICH: Thermally Stimulated Relaxation in Solids Topics in Applied Physics 37. kötet Springer-Verlag, 1979.**

Az első fejezetet bevezetésképp a szerkesztő írta, ebben szögezi le az alapelveket. Bräunlich itt erősen támaszkodik A. G. Milnes: Deep impurities in Semiconductors könyvére. Sorra kerülnek a reakció-kinetika, a szigetelők és félvezetők esetében kidolgozott egyensúlyi, ill. nem-egyensúlyi elektron statisztika eredményei. Bräunlich ismerteti a csapdába befogott töltéshordozók termikus kiszabadításával kapcsolatos csapdánív spektroszkópiát (TLS), a dielektromos polarizációs spektroszkópiát. A következő fejezet a lumineszcencia (TSL) és a vezetőképesség (TSC) hőmérséklet-függését tárgyalja, kitérve a kísérleti technikákra is, az alkalmazásra egy külön — a legeslegutolsó — fejezetben kerül sor. A harmadik fejezet a félvezetők kutatásában alkalmazott tértöltés spektroszkópia technikájával, a mély szintek átmeneti spektroszkópiáját (DLTS) külön kiemelve, foglalkozik. A további főleg elvi fejtegetést a mező által létrehozott termikus indukált áramokra (FITSC), ill. az exoemisszióra vonatkozik. Az előző esetben egy meghatározott hőmérséklettel való mérés alatt két elektród közé szendvicsezett szilárd dielektrikumra kialakult polarizáció felépülése és (vagy leépülése) által létrehozott áramokat mérnek. A második, az exoemisszió jelentősége olyan gyorsan növekszik, hogy pl. a Szovjetunióban néhány éve 7 kutató kezdte el azt a megbeszélést, amely ma pl. 1979-ben Taskentben több száz résztvevős konferenciára fejlődött.

(T. Gy.)

#### **G. BALLY (ed.): Holography in Medicine and Biology Springer Series in Optical Sciences. Springer-Verlag, 1979.**

A kötet Münsterben 1979. március 14—15-én tartott harmadik nemzetközi megbeszélés anyagát tartalmazza.

Az első ilyen munkaértekezletet 1973-ban New Yorkban Greguss Pál hívta össze, aki a jelen kötet 10., az akusztikai holográfiával foglalkozó részének szerzője.

A referáló úgy látja, hogy egy ilyen könyv ismertetésekor akkor nyújt a legtöbb információt, ha az általa, a 11. különböző témájú és méretű anyag közül egyet, így pl. a 8., ahol a holográfiának a fogorvoslásban való alkalmazhatóságával foglalkozik, mely maga is 25 oldal, néhány sorban megpróbálja bemutatni.



A fejezet bevezetőjét író H. I. Bjelkhagen egy stockholmi mérnöki intézetben dolgozik, bevezetőnek szánt cikkében rövid, szinte definíció-szerű ismertetést ad a hologram interferometria módszereiről: a kontúrgyűrűk segítségével mért deformációs elmozdulások valamint az ún. időátlag holográfiát felhasználva a vibrációk méréséről, a fogászati anyagok, ill. a fogpótlási eszközök ellenőrzéséről, a mandibuláris régióban in vivo felhasznált stomatológiai mechanika berendezésekkel, a kemény emberi szövet rugalmas tulajdonságára, majd az emberi fog funkciójának dinamikájára vonatkozó mérésekkel. A szerző külön vázolja a kísérleti berendezést és a klinikai kísérleteket a pulzáló holográfiát in vivo használó hologram interferometria esetén.

A következő fejezet három szerzője is nem fogorvosi szakembernek, hanem a cím (A fogászatban használt rugalmas szilikon-lenyomat dimenzionális stabilitásának holografikus kiértékelése) és a feldolgozás alapján fizikusnak tűnik, a dolgozat végén néhány sorban megadott mérési eredmények azonban értékes utalásokat adnak a fogorvosnak.

A fejezet utolsó két dolgozata világosan mérnökökből, fizikusokból és fogorvosokból álló team munkája. Az egyik az okklúziós erők által a fogakban és a mandibulában létrehozott deformációk méréséről, a másik ortodonciai beavatkozás folytán a faciális csontozatban létrejött feszültség eloszlást tárgyalja.

A nem említett fejezetek fülészeti, urológiai, szemészeti, ortopédiai, radiológiai, általános biológiai kérdéseket tárgyalnak.

Úgy vélem, minden orvos könyvtárában helye van e könyvnek.

(T. Gy.)

**H. FIEDLER (ed.): Structure and Mechanism of Turbulence I—II.  
Lecture Notes in Physics, Vol. 75  
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1978.**

A stacionárius egyensúly közelében a hidrodinamika alapegyenleteinek egyértelmű megoldásuk van. Bármilyen (fizikailag megengedett) kezdeti feltételekből kiindulva az áramlás asszimptotikusan közelít ehhez a megoldáshoz — elég kis Reynolds-szám esetén. Ha azonban a Reynolds-szám nagyobb egy kritikus értéknél, az áramlás instabilissá válik. A kicsi Reynolds-szám esetén érvényes megoldás „igazodik” a határfeltételek időbeli és térbeli szimmetriájához. Nagyobb Reynolds-szám esetén ez a szimmetria megszűnik: komplex szerkezetű áramlás alakul ki, amely a határfeltételek térbeli és időbeli szimmetriáját nem mutatja, de térben és időben „szabályos” tartományai vannak.

A Reynolds-szám további növelésével az áramlás kaotikussá, irregulárisra válik, noha — és ez paradoxon hangzik — az áramlást a hidrodinamika determinisztikus egyenletei írják le. E látszólagos paradoxon a hidrodinamikai alapegyenletek nem-linearitásából adódik.

Mikor mondhatjuk az áramlást turbulensnek? Mi a szukcesszív instabilitások természete? Milyen és mennyi instabilitás lép föl az áramlás kaotikussá válása előtt? Definálható-e egy fix Reynolds-szám, amely fölött az áramlás turbulenssé válik?

A recenzens ismeretei szerint ezekre a kérdésekre mindmáig nincs egyértelmű válasz, noha a turbulencia kérdéseivel olyan nagy elmék foglalkoztak, mint W. Heisenberg, G. Taylor, T. Kármán, A. Kolmogorov. A Tudományos Haladás Előmozdítására alakult Brit Egyesület ülésén 1932-ben Sir Horace Lamb — a hidrodinamika klasszikus mestere — a következő megjegyzést tette: „Őreg ember vagyok és hamarosan meghalok. Ha a mennybe jutok, két dologról szeretnék biztosat tudni: Az egyik a kvantumelektrodinamika, a másik a folyadékok turbulens mozgása. Az előzővel kapcsolatban voltaképp meglehetősen optimista vagyok.”

Mindezek ismeretében a recenzens (akinek nem volt lehetősége részt venni azon a konferencián, amelynek előadásait a könyv tartalmazza) fokozott kíváncsisággal, — de nem naív optimizmussal — olvasta a konferencia anyagát: mennyire jutottunk közelebb a turbulencia „rejtélyének” a megoldásához?

A „száraz” adatok: a konferencián (Symposium on Turbulence, Berlin, 1977. aug. 1—5) 13 országból 112 kutató vett részt, és ott 108 előadás hangzott el. (Ezeket tartalmazza a konferencia két kötetes kiadványa.)

A konferencia előadásainak áttanulmányozása révén a téma iránt érdeklődő szakember sok tekintetben informálódik, — de nem lesz optimistább: tudomásul kell vennie, hogy egy-egy speciális esetre biztató eredményeink vannak, a turbulencia azonban mindmáig rejtély maradt.

A könyv azonban nem csak a hidrodinamika iránt érdeklődő szakembereknek ajánlható. Az egyensúlyi állapottól távoli állapotnak fontos szerepe van a kémiában, a geofizikában, a plazmafizikában, a biológiában és a közgazdaságtanban is. Sok információt kaphatnak a kiadványból a témakör szakemberei. De persze válasz nélkül marad a kérdés: mi az a turbulencia?

Szabó János

### *Helyreigazítás*

A Magyar Fizikai Folyóirat 28. kötet 4. füzetébe értelemzavaró hiba került. A 384. lapon két össze nem tartozó ábra összevontan szerepel, két további (a 385. és 386. lapon) viszont szét van vágva (így az ábrák számozása végül is nem változik). Helyesen a 384. lap felső ábrája a 6. számú, alatta pedig a 7. található. A 6. ábrafőirat tehát csak a felsőre vonatkozik, a 7. ábrafőirat (a következő lapon) pedig az alsóra. A továbbiakban a 385. lapon található főiratát vesztett ábra a 386. lap 8. ábrája alá kerül. A 8. ábrafőirat a két grafikonra közösen vonatkozik.



## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Uchrin János</i> : Nagyfelbontóképességű Ge/Li detektorok kidolgozása s alkalmazásuk gerjesztett magnívók élettartam mérésére Doppler effektus felhasználásával .....	443
<i>Mészáros Attila</i> : A tardionok és tachionok közötti feltételezett szimmetria következményei ..	535

## A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>P. Jordan és W. Pauli jr.</i> : A töltésnélküli terek kvantumelektrodinamikája .....	551
---	-----

## KÖNYVISMERTETÉS

<i>M. H. Brodsky</i> (ed.): Amorphous semiconductors .....	571
<i>P. S. Theocaris, E. E. Gdoutos</i> : Matrix Theory of Photoelasticity .....	572
<i>Vladimir M. Fridkin</i> : Photoferroelectrics .....	572
<i>B. O. Seraphin</i> (ed.): Solar Energy Conversion .....	573
<i>A. Vértes, L. Korecz, K. Burger</i> : Mössbauer Spectroscopy .....	573
<i>G. Deconninck</i> : Introduction to Radioanalytical Physics .....	574
<i>J. D. Lawson</i> : The Physics of Charged-Particle Beams .....	575
<i>Heinrich Hora</i> : Nonlinear Plasma Dynamics at Laser Irradiation .....	575
<i>A. A. Oliner</i> (ed.): Acoustic Surface Waves .....	576
<i>R. Hazalett and D. Turner</i> (ed.): The Einstein Myth and the Ives Papers .....	577
<i>Hartmut M. Pilkuhn</i> : Relativistic Particle Physics .....	577
<i>M. Demianski</i> (ed.): Physics of the Expanding Universe .....	578
<i>Wolfgang Pauli</i> : Wissenschaftliche Briefwechsel mit Bohr, Einstein, Heisenberg u. a. Bd. I.	578
<i>H. Zingl, M. Haftel and H. Zankel</i> (ed.): Few Body Systems and Nuclear Forces II. ....	579
<i>C. Ciofi degli Atti and E. De Sanctis</i> (ed.): Few Body Systems and Electromagnetic Interactions .....	580
<i>H. Kressel</i> (ed.): Semiconductor Devices for Optical Communication .....	580
<i>P. Bräunlich</i> : Thermally Stimulated Relaxation in Solids .....	581
<i>G. Bally</i> (ed.): Holography in Medicine and Biology .....	581
<i>H. Fiedler</i> (ed.): Structure and Mechanisms of Turbulence .....	582

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Marton Andor

A kézirat nyomdába érkezett: 1980. V. 22. — Terjedelem: 12,25 (A/5)  
80-2267 — Szegedi Nyomda — Felelős vezető: Dobó József igazgató



# A MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT XXVII. KÖTETÉNEK TÁRGYMUTATÓJA

<i>Tarján Imre:</i> Köszöntő .....	3
<i>Lovas István:</i> Szalay Sándor és a magyar kísérleti fizika .....	7
<i>Dr. Kocsár László:</i> Szalay Sándor szerepe a hazai kísérletes orvostudomány fejlődésében .....	23
<i>Vogl Mária:</i> Szalay Sándor több évtizedes hatékony működése a geotudományokban .....	31
<i>Belák Sándor:</i> Szalay Sándor munkássága az agrártudományok területén .....	45
Szalay Sándor tudományos munkáinak jegyzéke .....	53
<i>Jánossy Mihály:</i> Jánossy Lajos, a fizikus és az ember .....	77
Gyulai Zoltán emlékére, 90. születésnapja alkalmából tartott tudományos ülésen elhangzott előadások:	
<i>Barna Árpád, Barna B. Péter, Radnóczy György, Tóth Lajos:</i> Vékonyrétegek kristályainak növekedése idegen anyagok atomjainak jelenlétében .....	83
<i>Görög T., Lendvay Ö.:</i> GaAsP túkristályok növekedése gőzfázisból .....	97
<i>Hartmann Ervin:</i> Alkali-halogenid kristályok növekedési formáinak stabilitása .....	103
<i>Malicskó László:</i> Megfigyelések a lavinaszerű kristályképződéssel kapcsolatban .....	109
<i>Morlin Zoltán:</i> Kísérletek szilárdfázisú növekedési folyamatok köréből .....	119
<i>Paitz József és Zsoldos Lehelné:</i> Oxidkristályok növesztése és röntgentopográfia .....	143
<i>Tóth András és Sárközi József:</i> Mozgó diszlokációk és ponthibák kölcsönhatásának vizsgálata ionkristályok plasztikus deformációjánál fellépő effektusok mérésével .....	161
<i>Niedermayer Ferenc:</i> Hadronok nagyenergiás szerkezete .....	169
<i>Kollár János:</i> Átmeneti és nemesfémek kohéziós és rugalmas tulajdonságai .....	209
<i>Patkós András:</i> A kvantumelektrodinamika globális jellemzése téridő rácson .....	289
<i>Kugler Sándor:</i> A nematikus folyadékkristályok mikrodinamikájának vizsgálata .....	309
<i>Janszky József:</i> A diszlokációs terek hatása a ponthibákon lokalizált elektronokra és rezgésekre .....	411
<i>Mayer-Böricke Claus U.:</i> Az óriásrezonanciák kísérleti vizsgálata könnyű magokban, makroszkopikus és mikroszkopikus vonatkozások .....	465
<i>Kamarás Katalin:</i> Fizikai-kémiai vizsgálatok elektromosan vezető donor-akceptor sókon .....	515
<i>Parragh Levente:</i> Kétfajta leptontöltés egy lehetséges geometriai értelmezése .....	573
<i>Giber János, Riedel Miklós és Súlyom András:</i> Újabb eredmények és lehetőségek a kvantitatív SIMS vizsgálatokban .....	579
<i>Vad Kálmán:</i> Szupravezető kvantum-interferométerek működési elvei .....	599

## A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>Roger Penrose:</i> A twistor-elmélet céljai és eredményei .....	343
--	-----

## A IUPAP HÍREI

Az 1978-ban Stockholmban tartott XVI. közgyűlés által megválasztott IUPAP tisztségviselők és a nemzetközi bizottságok tisztségviselői, valamint tagjai .....	59
IUPAP konferenciák 1979-ben .....	65



# KÖNYVISMERTETÉSEK

<i>J. C. Legros, J. K. Platten (ed): Les instabilités hydrodynamiques en convection libre, forcée et mixte</i> .....	69
<i>J. B. Keller, J. S. Papadakis (ed): Wave Propagation and Underwater Acoustics</i> .....	69
<i>Inelastic Electron Tunneling Spectroscopy</i> .....	70
<i>Grauert-Fischer: Differential and Integralrechnung II</i> .....	70
<i>R. J. Keyes (ed): Optical and Infrared Detectors</i> .....	71
<i>E. A. Spiegel and J. P. Zahn (ed): Problems of Stellar Convection</i> .....	71
<i>J. A. Azcárraga (ed): Topics in Quantum Field Theory and Gauge Theories</i> .....	72
<i>M. Cardona and L. Ley (ed): Photoemission in Solids I</i> .....	73
<i>R. H. Kingston: Detection of Optical and Infrared Radiation</i> .....	74
<i>L. Garrido, F. Segler, P. J. Shepherd: Stochastic Processes in Nonequilibrium Systems</i> .....	307
<i>A. H. Zewail: Advances in Laser Chemistry</i> .....	307
<i>A. Nishida: Geomagnetic diagnosis of the magnetosphere</i> .....	495
<i>H. Zingl, M. HafTEL és H. Zankel (szerk.): Few Body Systems and Nuclear Forces I</i> .....	496
<i>P. Kramer and A. Rieckers (ed): Group Theoretical Methods in Physics Proceedings</i> .....	496
<i>S. L. Shapiro (ed): Ultrashort Light Pulses. Picosecond Techniques and Applications</i> .....	498
<i>R. L. Miller (ed): Flow-induced Crystallization in Polymer Systems</i> .....	498
<i>G. W. Cullen és C. C. Wang (szerk.): Heteroepitaxiális félvezetők elektronikus eszközök számára</i> .....	499
<i>C. J. M. Rooijmans (ed): Crystals Growth, Properties and Applications. Crystals for Magnetic Applications</i> .....	500
<i>Fazekas Patrik—Gazsó János—Kósa Somogyi István: Amorf félvezetők</i> .....	500
<i>Siklós Tivadar (szerk.): A szilárdtestkutatás újabb eredményei III. kötet</i> .....	502
<i>D. Casasent (szerk.): Optical Data Processing</i> .....	502
<i>J. T. Fraser, N. Lawrence, D. Park (ed.): The Study of Time III</i> .....	503
<i>P. C. Sabatier (ed.): Applied Inverse Problems</i> .....	503
<i>Aldo Bressan: Relativistic Theories of Materials</i> .....	504
<i>G. dell'Antonio, S. Doplicher and G. Jona-Lasinio: Mathematical Problems in Theoretical Physics</i> .....	504
<i>G. Ludwig: Die Grundstrukturen einer physikalischen Theorie</i> .....	504
<i>A. V. Gurevich: Nonlinear Phenomena in the Ionosphere</i> .....	505
<i>Landolt-Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology</i> ..	505
<i>H. H. Kausch: Polymer Fracture</i> .....	506
<i>Richtmayer, Robert D.: Principles of advanced Mathematical Physics</i> .....	507
<i>K. Binder (ed.): Monte Carlo Methods in Statistical Physics</i> .....	507
<i>E. Lohrman: Hochenergiephysik</i> .....	508
<i>T. Mayer-Kuckuk: Atomphysik</i> .....	508
<i>R. P. Huebener: Magnetic Flux Structures in Superconductors</i> .....	509
<i>E. Becker: Technische Strömungslehre</i> .....	510
<i>A. R. Bishop, T. Schneider (ed.): Solitons and Condensed Matter Physics</i> .....	510
<i>K. Bethge (szerk.): Experimental Methods in Heavy Ion Physics</i> .....	511
<i>I. A. Sellin (szerk.): Structure and Collisions of Ions and Atoms</i> .....	512
<i>H. Dachs (ed.): Neutron Diffraction</i> .....	512
<i>G. Alefeld and J. Völkl (ed.): Hydrogen in Metals</i> .....	513
<i>P. Hautojärvi (szerk.): Positrons in Solids</i> .....	514
<i>U. Müller, K. G. Roesner, B. Schmidt (ed.): Recent Developments in Theoretical and Experimental Fluid Mechanics. Compressible and Incompressible Flows</i> .....	625
<i>J. W. Strohbehm (ed.): Laser Beam Propagation in the Atmosphere</i> .....	625
<i>M. A. Van Hove—S. Y. Tong: Surface Crystallography by LEED</i> .....	626
<i>I. M. Yaglom: A Simple Non-Euclidean Geometry and Its Physical Basis</i> .....	626